LINEARE VERSUS NICHTLINEARE STABILITÄT FÜR RUNGE - KUTTA - VERFAHREN

Dissertation
der Mathematischen Fakultät der
Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
vorgelegt

HELMUT TÜRKE
aus Eggenfelden

1983

UNIV.
LONDON
COLL.

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547613_0004

LINEARE VERSUS NICHTLINEARE STABILITÄT FÜR RUNGE - KUTTA - VERFAHREN

Dissertation

der Mathematischen Fakultät der

Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

zur Erlangung des Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

vorgelegt

Helmut Türke

aus Eggenfelden

1983

Tag der mündlichen Qualifikation:	1. Dezember 1983
Dekan:	Prof. Dr. U. Felgner
1. Berichterstatter:	Prof. Dr. R. Scherer
2. Berichterstatter:	Prof. Dr. K. Zeller

Lineare versus nichtlineare Stabilität für Runge - Kutta - Verfahren.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung		1
§ 1	Grundlagen	5
§ 2	Stabilitätsuntersuchungen mit V-Transformation	13
§ 3	Charakterisierung A-verträglicher Approximationen an exp(z)	26
§ 4	Unterschiede von linearer und nichtlinearer Stabilität	44
§ 5	Strukturaussagen	64
§ 6	Symmetrie-Betrachtungen	77
§ 7	Der Grenzfall M = $\underline{0}$	86
Anhang		98
Literaturverzeichnis		112

Einleitung

In vielen Teilgebieten der modernen Naturwissenschaften ist die numerische Lösung einer gewöhnlichen Differentialgleichung oder eines Systems von Differentialgleichungen bei gegebenem Anfangswert eine häufig vorkommende Aufgabe. Numerische Verfahren dazu sind seit langem bekannt; bereits im 18. Jahrhundert gab L. Euler ein nach ihm benanntes Verfahren an (Euler[1768]). C. Runge und W. Kutta (Runge[1895] bzw. Kutta[1901]) gaben um die Jahrhundertwende den Anstoß für die Entwicklung von neuen Verfahren, welche zur Erhöhung der Genauigkeit Hilfspunkte benützten und auf einfachste Auswertung ausgelegt waren.

Etwa ab 1960 wurden durch das Aufkommen von elektronischen Rechenanlagen zahlreiche weitere Verfahren entwickelt bzw. bestehende Verfahren in umfangreichere Klassen eingebettet. Heute verfügt man über eine große Anzahl von Verfahren unterschiedlicher Struktur, welche bzgl. gewissen Forderungen Vor- und Nachteile aufweisen.

Als ein wesentlicher Gesichtspunkt in der Anwendung eines numerischen Verfahrens hat sich die Frage nach der Stabilität erwiesen. Darunter verstehen wir das Vermögen einer Methode, das lokale oder globale Verhalten der exakten Lösung eines vorgelegten gewöhnlichen DGL-Systems zu gegebener Schrittweite $h>0$ richtig zu simulieren (Verschärfung der asymptotischen Stabilität).

Um für ein numerisches Verfahren Stabilität in diesem Sinne zu sichern, wurden in der Vergangenheit zahlreiche Ansätze gemacht. Als der wichtigste Stabilitätsbegriff gilt der von G. Dahlquist [1963] eingeführte Begriff der 'A-Stabilität'. Dabei wird das Wachstumsverhalten der numerischen Lösungen für die Testgleichung $y'=qy$ $(q \in \mathbb{C})$ untersucht, deren exaktes Lösungsverhalten bekannt ist (Beschränktheit des globalen Diskretisierungsfehlers).

UNIV. LEIDEN MATH.

Man erkannte jedoch rasch bei der Behandlung von komplexeren nichtlinearen (insbesondere steifen) Anfangswertaufgaben, daß A-stabile Näherungsverfahren (zB. Trapezregel) nicht mehr das vorgeschriebene Simulationsverhalten zeigten. Dies führte wiederum durch G. Dahlquist[1975] zur Betrachtung allgemeinerer Testgleichungen, sogenannten dissipativen Systemen ('G-Stabilität' für one-leg Mehrschrittverfahren). Dissipative Systeme, dh. Anfangswertaufgaben $y'=f(t,y)$, $y(0)=y_0$ mit dissipativer Funktion f, besitzen zu verschiedenen Anfangswerten y_0,z_0 bzgl. einer induzierten Norm kontraktive Lösungen $y(t),z(t)$, $t\geq 0$ (Stabilität=Kontraktivität).

Eine entsprechende Verallgemeinerung der G-Stabilität für s-stufige Runge-Kutta-Verfahren (RKV) lieferte Butcher[1975] durch die Einführung des B-Stabilitäts-Begriffes. Ein RKV wird als B-stabil bezeichnet, wenn es bei Anwendung auf eine autonome AWA $y'=f(y)$, $y(0)=y_0$ mit dissipativem f zu verschiedenen Anfangswerten y_0,z_0 numerische Lösungen in diskreten Punkten eines Gitters $G\subseteq\mathbb{R}$ liefert, welche sich kontraktiv zueinander verhalten.

Für s-stufige RKV mit paarweise verschiedenen Stützstellen leiteten schließlich Burrage-Butcher[1979] eine Charakterisierung der nichtautonomen Verallgemeinerungen von A- und B-Stabilität, die AN- bzw. BN-Stabilität, mittels einer Positivitätsbedingung (algebraische Stabilität) her, welche ausschließlich von den Koeffizienten des RKV abhängt. Demgegenüber konnte, aufgrund der analytisch nur schwer zu beschreibenden A-Stabilität, der Unterschied dieser nichtlinearen Stabilitäts-Begriffe zu dem linearen A-Stabilitäts-Begriff nur in einzelnen Fällen oder für bestimmte Scharen von Verfahren hoher Ordnungen (cf. Wanner[1980b]) gezeigt werden. E. Hairer vermutete in diesem Zusammenhang (cf. Hairer [1982]), daß es zu jedem A-stabilen RKV mit positiven Gewichten ein algebraisch stabiles Verfahren mit derselben Ordnung und Stabilitätsfunktion gibt.

In der vorliegenden Arbeit befassen wir uns mit einer analytischen Untersuchung des Unterschiedes zwischen dem linearen A- und den nichtlinearen AN-, BN- bzw. algebraischen Stabilitätsbegriffen für ein s-stufiges RKV mit positiven Gewichten. Im linearen sowie im nichtlinearen Fall, letzterer durch die analytisch am einfachsten zu behandelnde algebraische Stabilität vertreten, kann die RK-Matrix A auf eine Grund- bzw. Normalform zurückgeführt werden, die eine Charakterisierung der linearen und nichtlinearen Stabilität über eine restringierende Positivitäts-Forderung erlaubt : reelle Positivität einer Residuenfunktion χ_Q bzw. positive Semidefinitheit von $Q+Q^T$, wobei Q eine Residuenmatrix bezeichnet, deren Dimension nur von der Ordnung des RKV abhängt (Satz 4.2).

Beide Bedingungen werden verglichen und an einigen Beispielen illustriert. Durch die Anwendung eines Kriteriums, das reell-positive Transferfunktionen eines Kontroll-Systems über eine Lösbarkeitsbedingung einer Lyapunov-Matrizengleichung charakterisiert, auf die zu einem RKV ß gehörende modifizierte Stabilitätsfunktion Θ bzw. Residuenfunktion χ_k (Satz 4.11), kann die Vermutung von Hairer verifiziert werden (Satz 4.12). Ferner ergibt sich daraus eine interessante Möglichkeit der Charakterisierung des Unterschiedes von linear- und nichtlinear stabilen RKV (Korollar 5.6).

Der Grundgedanke der Stabilität, das Wachstumsverhalten der exakten Lösung eines vorgegebenen DGL-Systems durch die numerischen Lösungen eines RKV richtig zu simulieren, wird in den letzten beiden Paragraphen nochmals aufgegriffen. Von allen eingeführten Stabilitätsbegriffen (A, AN, B, BN, algebraisch) wird im wesentlichen nur eine Simulation der (bzgl. einer gewählten Norm) nichtsteigenden Lösungen gefordert. Eine Dämpfung von steigenden Lösungen ist hier allerdings auch möglich. Fordert man jedoch von einem RKV mit positiven Gewichten auch die richtige Simulation von nichtfallenden Lösungen, so stößt man auf Verfahren, deren Stabilitätsmatrix M verschwindende Elemente besitzt.

Es zeigt sich, daß RKV mit $M=\underline{0}$ als Fixpunkte einer Komposition von Spiegelungs- und Transpositions-Abbildung in der Menge $\mathbb{B}_s$

aller s-stufigen RKV charakterisiert werden können (Satz 6.5). Ferner impliziert die verschwindende Stabilitätsmatrix M für ein RKV mit positiven Gewichten ein Stabilitätsgebiet S_{AN} bzgl. des AN-Stabilitätsbegriffes, welches identisch mit $[\bar{\mathbb{C}}_-]^B$ ist (Lemma 6.6). Diese Verfahren reagieren somit in ihrem Wachstumsverhalten sehr sensibel auf Dissipativität-/Accretivität-Änderungen des vorgelegten DGL-Systems. Aufgrund der speziellen Gestalt des Stabilitätsgebietes S_{AN} kann hier, in Anlehnung an den klassischen (linearen) Symmetrie-Begriff von Stetter[1973], von nichtlinear symmetrischen RKV gesprochen werden.

Im abschließenden Paragraphen 7 werden weitere Eigenschaften von Verfahren mit $M=\underline{0}$ hergeleitet. Insbesondere zeigt sich, daß eine Dämpfung der Wachstumsfunktion eines RKV für gegen unendlich gehendes Argument ('Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$') hier nicht möglich ist. Als Alternative werden algebraisch stabile Verfahren mit Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ und minimalstem Überdämpfungsgebiet angegeben. Ein Kriterium für minimale Überdämpfung läßt sich für RKV mit positiven Gewichten durch die Übertragung der von Dahlquist-Jeltsch[1979] angegebenen 'verallgemeinerten Kreisscheiben' auf die gespiegelten Verfahren herleiten (Lemma 7.5). Satz 7.6 zeigt, daß es algebraisch stabile RKV mit Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ und beliebig kleinem Überdämpfungsgebiet gibt. Verfahrens-Scharen dieses Typs, sowie Scharen von $M=\underline{0}$-Verfahren verschiedener Stufenzahlen und Ordnungen schließen diesen Paragraphen ab.

Herrn Prof. Dr. R. Scherer und Herrn Prof. Dr. K. Zeller danke ich herzlich für die Anregung zu dieser Arbeit, für zahlreiche Gespräche und die ermutigende Unterstützung während des Entstehens dieser Arbeit. Ferner danke ich Herrn Prof. Dr. E. Hairer (Heidelberg) für wertvolle Hinweise, insbesondere zu Satz 4.12.

§ 1 Grundlagen

Anfangswertaufgabe.

Vorgelegt sei eine Anfangswertaufgabe (AWA)

$$y' = f(t,y) \ , \quad y(0) = y_o \ , \tag{1.1}$$

wobei $f: I \times D \to \mathbb{K}^m$, $I := [0,a] \subseteq \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{K}^m$, $y_o \in \mathbb{K}^m$ und $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{C}$. f sei ferner hinreichend glatt, so daß die Lösung y mit $y(0) = y_o$ existiert und eindeutig bestimmt ist.
Gesucht ist auf einem Gitter

$$I_h' := \{ \, t \in I \mid t = t_n, \ n = 0,..,N, \ t_o := 0, \ t_{n+1} := t_n + h_n \ , \ t_N := a \, \} \tag{1.2}$$

eine Näherungslösung $y_h : I_h' \to \mathbb{K}^m$. In zahlreichen Fällen wird auf ein äquidistantes Gitter I_h ($h_n := h$, $n = 0,..,N$) zurückgegriffen.
Mittels eines Einschritt-Verfahrens (ESV)

$$y_{n+1} = y_n + h \, \phi_f(t_n, y_n, h) \tag{1.3}$$

sind die Näherungswerte $y_n =: y_h(t_n)$ in den diskreten Punkten t_n ($n = 0, ..,N$) zu berechnen. Dabei ist $\phi_f = \phi_f(y,t,h)$ eine das ESV kennzeichnende Zuwachsfunktion, welche im wesentlichen eine Kombination von Auswertungen von f in diskreten Punkten (auch ausserhalb von I_h) bzw. eine Approximation an $f(t,y)$ in I_h darstellt.
Die Genauigkeit eines ESV (1.3) zur numerischen Lösung einer AWA (1.1) wird durch den Begriff der Konsistenz-Ordnung erklärt. Das ESV (1.3) besitzt die Konsistenz-Ordnung p ($\in \mathbb{N}$), falls für alle f

$$y(t+h) - y(t) - h \, \phi_f(t, y(t), h) \ = \ O(h^{p+1}) \qquad (h \to 0) \tag{1.4}$$

für alle $t \in I_h$ (cf. Grigorieff [1972]).

Runge-Kutta Verfahren.

Für die numerische Lösung einer AWA (1.1) betrachten wir in dieser Arbeit eine Hauptklasse von ESV, nämlich die Klasse der s-stufigen Runge-Kutta Verfahren (RKV). Dabei ist s eine vorgegebene natürliche Zahl (Stufenzahl) und es existiere kein dazu äquivalentes s'-stufiges RKV mit $s' < s$ (Irreduzibilität, cf. Stetter[1973], S. 127). Das RKV ß ist durch ein Tripel ß = [c,A,b] eindeutig festgelegt, wobei

$$c := (c_1, \ldots, c_s)^T \quad \text{den Knoten- (Stützstellen-) Vektor,}$$
$$A := (a_{ij})_{i,j=1}^{s} \quad \text{die Koeffizientenmatrix und} \qquad (1.5)$$
$$b := (b_1, \ldots, b_s)^T \quad \text{den Gewichtsvektor}$$

des RKV ß bezeichnet. [c,b] ist die dem RKV ß zugrunde liegende Quadraturformel (QF). An zahlreichen Stellen (§2 - §7) wird auch auf die geshiftete RK-Matrix

$$C := A - \frac{1}{2} \mathbf{1}\, b^T \qquad (1.6)$$

zurückgegriffen, wobei $\mathbf{1} := (1, \ldots, 1)^T \in \mathbb{R}^s$.
Mittels eines s-stufigen RKV ß = [c,A,b] berechnen sich die gesuchten Näherungswerte y_n (n=1,...,N) durch die Vorschrift (n=0,...,N-1)

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i\, f(t_n + c_i h, Y_i) \quad , \\ Y_i &= y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, f(t_n + c_j h, Y_j) \quad , \; i=1,\ldots,s \quad . \end{aligned} \qquad (1.7)$$

Dabei stellen die $Y_i \in \mathbb{K}^m$ interne Approximationen an $y(t_n + c_i h)$ (i=1,...,s) dar. ß heißt explizit, falls $a_{ij}=0$ für alle $i \leq j$. In diesem Fall läßt sich das zweite Gleichungssystem in (1.7) explizit lösen. Ist $a_{ij}=0$ für $i<j$, so heißt ß semi-implizit, und implizit, falls es weder explizit noch semi-implizit ist. Dabei ergibt sich das zusätzliche Problem der Lösung eines nichtlinearen Gleichungs-Systems, für welches im allgemeinen Iterations-Verfahren verwendet werden.
Wendet man das RKV ß auf eine AWA (1.1) an, deren rechte Seite unabhängig von y ist (y'=f(t)), so stellt (1.7) eine Quadratur-Formel (QF) dar. Ist die (Konsistenz-) Ordnung des RKV p, so ist aus (1.4) leicht zu erkennen, daß auch die dem RKV zugrunde liegende QF [c,b] die Ordnung p, dh. den Exaktheitsgrad p-1 besitzt.
Mit der Theorie der Elementaren Differentiale (Butcher[1964a]) lassen sich bei vorgegebener Ordnung p eines RKV ß einige wichtige Beziehungen der Koeffizienten c_i, a_{ij}, b_j $(i,j \in \{1,\ldots,s\})$ zeigen. Dazu werden folgende Abkürzungen eingeführt

$$\begin{aligned} B(\xi) \quad &: \quad \sum_{i=1}^{s} b_i\, c_i^{l-1} = \frac{1}{l} \quad , \quad 1 \leq l \leq \xi \; ; \\ C(\rho) \quad &: \quad \sum_{j=1}^{s} a_{ij}\, c_j^{l-1} = \frac{1}{l} c_i^{l} \quad , \quad 1 \leq l \leq \rho \; , \; 1 \leq i \leq s \; ; \end{aligned} \qquad (1.8)$$

$$D(\eta) \quad : \quad \sum_{i=1}^{s} b_i \, c_i^{n-1} \, a_{ij} = \frac{1}{n} \, (1-c_j^n) \ , \ 1 \le n \le \eta \ , \ 1 \le j \le s \ ; \tag{1.8}$$

$$E(\zeta,\mu) \quad : \quad \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{s} b_i \, c_i^{n-1} \, a_{ij} \, c_j^{l-1} = \frac{1}{l(n+l)} \ , \ 1 \le n \le \zeta \ , \ 1 \le l \le \mu \ ;$$

$$(\xi,\rho,\eta,\zeta,\mu \in \mathbb{N}).$$

$B(\xi)$ entspricht einer Exaktheitsbedingung der zugrunde liegenden QF für $f(t,y)=t^{l-1}$, $l=1,\ldots,\xi$. Ebenso ist $C(\rho)$ eine Ordnungsbedingung für die internen Approximationen Y_i aus (1.7) und $D(\eta)$ läßt sich als entsprechende Ordnungsbedingung eines zu ß transponierten RKV (cf. (1.22)) deuten.

Stabilität

Wir werden im folgenden Stabilitätsbegriffe betrachten, die das qualitative Verhalten der Näherungslösungen für eine (beliebig, aber fest) gewählte Schrittweite $h>0$ beschreibt. Dies ist insbesondere für die numerische Behandlung von steifen DGL-Systemen (cf. Grigorieff [1972], S.85) von großer Wichtigkeit.
Ein Näherungsverfahren zur Lösung einer AWA (1.1) wird als stabil bezeichnet, wenn die numerischen Lösungen das globale Lösungsverhalten des zugrunde liegenden DGL-Systems 'richtig' simulieren. Dabei wird ein Anwachsen (bzgl. einer gewählten Norm) einer exakten Lösung als natürliche Instabilität betrachtet, so daß als Richtlinie für richtige Simulation Systeme betrachtet werden, deren Lösungen bzgl. der gewählten Norm fallend (kontraktiv) sind. Dazu werden wir verschiedene Funktionen-Klassen betrachten, die kontraktives Verhalten sichern.

Sei $\langle .,. \rangle$ ein fest vorgegebenes Skalarprodukt im $\mathbb{K}^m$ mit zugehöriger Norm $\|x\| := \langle x,x \rangle^{1/2}$ $(x \in \mathbb{K}^m)$. Betrachte die DGL-Systeme $y' = f(t,y)$ mit f aus folgenden (Funktionen-) Klassen (cf. Dahlquist[1963], Butcher[1975], Burrage-Butcher[1979]) :

$$\mathcal{A} := \{ f \mid f(t,y) = q\,y \ , \ q \in \mathbb{C} \ , \ \mathrm{Re}(q) \le 0 \} \tag{1.9}$$

$$\mathcal{AN} := \{ f \mid f(t,y) = q(t)\,y \ , \ q(t) \in \mathbb{C} \ , \ \mathrm{Re}(q(t)) \le 0 \ \bigwedge_{t \in I} \} \tag{1.10}$$

$$\mathcal{B} := \{ f \mid \mathrm{Re} \langle f(u) - f(v), u - v \rangle \le 0 \ \bigwedge_{u,v \in D} \} \tag{1.11}$$

$$\mathcal{BN} := \{ f \mid \mathrm{Re} \langle f(t,u) - f(t,v), u - v \rangle \le 0 \ \bigwedge_{u,v \in D} \ \bigwedge_{t \in I} \} \ . \tag{1.12}$$

Lemma 1.1

Die Lösungen der AWA (1.1) mit f aus den Klassen (1.9) - (1.12) verhalten sich bzgl. der induzierten Norm kontraktiv. Das heißt, daß zu beliebigen verschiedenen Anfangswerten u_o, v_o für die zugehörigen Lösungen u,v gilt

$$\| u(t+h) - v(t+h) \| \leq \| u(t) - v(t) \| \quad \bigwedge_{h \geq 0} \bigwedge_{t \in I} . \qquad (1.13)$$

Beweis. Die Klassen $\mathcal{A}$, $\mathcal{AN}$ und $\mathcal{B}$ sind Teilmengen von $\mathcal{BN}$, sodaß die Behauptung (1.13) für die Funktionen-Klasse $\mathcal{BN}$ zu zeigen bleibt. Sei $f \in \mathcal{BN}$. Da für alle $t \in I$

$$\frac{d}{dt} \| u(t) - v(t) \|^2 = 2 \operatorname{Re} \langle f(t,u) - f(t,v),\ u - v \rangle \leq 0 ,$$

ist $\| u - v \|$ eine positive nichtsteigende reellwertige Funktion, woraus die Behauptung folgt. □

DGL-Systeme mit $f \in \mathcal{BN}$ werden auch als dissipative Systeme bezeichnet. Ein zu (1.13) analoges Verhalten der numerischen Lösungen eines RKV ß, dh. eine Simulation des kontraktiven Lösungsverhalten des zugrunde liegenden Systems wird nun durch folgende Definition gefordert.

Definition 1.2

Ist eine AWA (1.1) gegeben, so heißt ein (numerisches) Näherungs-Verfahren numerisch kontraktiv, wenn für zwei Näherungslösungen y_h und z_h zu beliebigen verschiedenen Anfangswerten y_o und z_o gilt

$$\| y_h(t+h) - z_h(t+h) \| \leq \| y_h(t) - z_h(t) \| \quad \bigwedge_{t \in I_h} . \qquad (1.14)$$

Für RKV ß, angewandt auf eine AWA (1.1) mit f aus den Funktionen-Klassen (1.9) - (1.12) erhält man somit eine einheitliche Definition der Stabilität.

Definition 1.3

Ein s-stufiges RKV ß heißt A- bzw. AN- bzw. B- bzw. BN-stabil, wenn es bei Anwendung auf eine AWA (1.1) mit $f \in \mathcal{A}$ bzw. $f \in \mathcal{AN}$ bzw. $f \in \mathcal{B}$ bzw. $f \in \mathcal{BN}$ numerisch kontraktiv ist.

Für ein RKV ß = [c,A,b] ist A-Stabilität äquivalent zu der Forderung

$$|W_ß(z)| \leq 1 \quad \text{für alle} \quad z \in \bar{\mathbb{C}}_- := \{z \in \mathbb{C} \mid Re(z) \leq 0\} \quad ,$$

wobei

$$W_ß(z) := 1 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbf{1} \quad . \tag{1.15}$$

Man erkennt diese Äquivalenz sofort durch Einsetzen der AWA (1.1) mit $f(t,y) := qy$ $(q \in \mathbb{C})$ in das Verfahren (1.7) und Substitution der zweiten in die erste Gleichung, wobei $z := qh$ gesetzt wird. $W_ß$ heißt Stabilitäts-Funktion des RKV ß und stellt eine rationale Approximation an exp(z) dar. Eine rationale Funktion wird als A-verträglich bezeichnet, falls sie für alle $z \in \bar{\mathbb{C}}_-$ betragsmäßig durch 1 beschränkt ist. Ein A-stabiles RKV ß liefert somit eine A-verträgliche Approximation an die Exponentialfunktion. Besitzt das RKV ß die Ordnung p, so ist auch W eine rationale Approximation an exp(z) der Ordnung p, dh. es gilt für $z \to 0$ (cf. Hall-Watt [1976], S.146)

$$W(z) - \exp(z) = O(z^{p+1}) \quad .$$

Die zu $W_ß$ gehörende Teilmenge der komplexen Ebene

$$S_A := \{ z \in \mathbb{C} \mid |W_ß(z)| \leq 1 \} \tag{1.16}$$

wird als A-Stabilitätsbereich des RKV ß bezeichnet. Insbesondere für L-stabile Verfahren (A-stabil und $|\lim W_ß(z)| < 1, |z| \to \infty$) umfaßt S_A mehr als die linke komplexe Halbebene, wodurch auch nicht-dissipative AWA'n numerisch kontraktive Lösungen besitzen können. Auf diese Problematik wird in § 7 nochmals genauer eingegangen werden.
Analog zu obiger äquivalenter Beschreibung der A-Stabilität mittels der Stabilitätsfunktion (1.15) lassen sich AN-stabile RKV durch die Stabilitätsfunktion

$$\tilde{W}_ß(Z) := 1 + b^T Z(I - AZ)^{-1}\mathbf{1} \quad \text{mit } Z := \mathrm{diag}(z_1,\ldots,z_s) \tag{1.17}$$

charakterisieren. Ein RKV ß = [c,A,b] ist genau dann AN-stabil, wenn

$$|\tilde{W}_ß(Z)| \leq 1 \quad \text{für alle} \quad z_i \in \bar{\mathbb{C}}_- \ (i=1,\ldots,s) \quad \text{mit}$$

$z_i \neq z_j$, falls $c_i = c_k$ $(i,k \in \{1,\ldots,s\})$ (cf. Burrage-Butcher [1979]).
Mit

$$S_{AN} := \{ (z_1,\ldots,z_s) \in \mathbb{C}^s \mid |\tilde{W}_ß(Z)| \leq 1 \} \tag{1.18}$$

wird der AN-Stabilitätsbereich bezeichnet.

Eine analytische Beschreibung von BN-stabilen RKV führt zu einem weiteren zentralen Stabilitätsbegriff, der algebraischen Stabilität.

Definition 1.4 (Burrage-Butcher[1979])

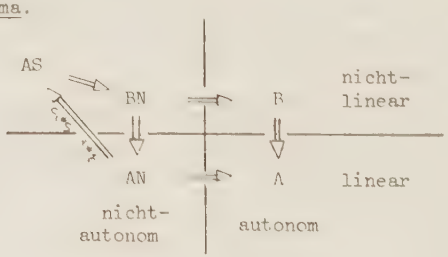
Ein RKV ß = [c,A,b] heißt algebraisch stabil (AS) genau dann, wenn

$$B := \mathrm{diag}(b_1,\ldots,b_s) > 0 \quad \text{und}$$
$$M := BA + A^T B - bb^T \geq 0 \quad \text{(positiv semi-definit)} . \tag{1.19}$$

M heißt Stabilitätsmatrix des RKV ß.

Die strikte Positivität der Gewichte in (1.19) bedeutet gegenüber der Definition von Burrage-Butcher[1979] keine Einschränkung. Ist ein Gewicht $b_k = 0$ ($k \in \{1,\ldots,s\}$), so muß aufgrund von $M \geq 0$ die k-te Spalte von A bis auf das Diagonalelement a_{kk} verschwinden, wodurch das Verfahren reduzibel wird. Für RKV mit paarweise verschiedenen Knoten ($c_i \neq c_j$, $i \neq j$) sind die nichtlinearen Stabilitätsbegriffe BN und AN äquivalent zu algebraischer Stabilität (cf. Burrage-Butcher[1979]).
Es ist bemerkenswert, daß ausschließlich durch Bedingungen an die Koeffizienten eines RKV die numerische Kontraktivität für dissipative DGL-Systeme ($f \in \mathcal{BV}$ aus (1.12)) gewährleistet ist.
Diese Tatsache wird im nächsten Paragraphen 2 ausgenützt werden, um für RKV einer vorgegebenen Ordnung p und einer zugrunde liegenden QF [c,b] eine Grundform S der geshifteten RK-Matrix C aus (1.6) herzuleiten. Anhand S ist eine rasche Überprüfung der algebraischen Stabilität möglich und auch umgekehrt dient S zur Konstruktion von algebraisch stabilen RKV einer vorgegebenen Ordnung p (Satz 2.6).

Stabilitäts-Schema.



(1.20)

Reell-positive Funktionen.

Um einen Vergleich von A-stabilen und algebraisch stabilen RKV durchzuführen, wird in § 3 die (lineare) Stabilitätsfunktion $W_ß$ aus (1.15) einer Cayley-Transformation unterworfen. Mittels einer anschließenden Variablentransformation erhält man eine Charakterisierung A-stabiler

RKV durch reell-positive Funktionen (Satz 3.2).

Definition 1.5

Eine komplexe Funktion f: $\mathbb{C} \supseteq D \to \mathbb{C}$ heißt eine reell-positive Funktion (RPF) genau dann, wenn

(i) f(z) für alle Re(z)>0 holomorph ist und
(ii) Re f(z) > 0 für alle Re(z)>0 . (1.21)

Die Menge aller RPF wird mit $\mathbb{P}$ bezeichnet.

Reell-positive Funktionen treten in vielen Bereichen der angewandten Mathematik auf, wie zB. bei Impedanz-Beschreibungen von passiven Netzwerken (cf. Belevitch [1982]). Einige wichtige Eigenschaften von RPF, die in Paragraph 3 benötigt werden, sind in folgendem Lemma zusammengestellt. Weitere Eigenschaften werden im Anhang A2. aufgeführt.

Lemma 1.6 (Dahlquist [1978])

Seien r,s Polynome und $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ mit $\alpha>0$, $\beta \geq 0$.

(i) Sind $f,g \in \mathbb{P}$, so sind $\alpha f + \beta g \in \mathbb{P}$ und $g(f) \in \mathbb{P}$.
(ii) Ist $f = r/s \in \mathbb{P}$, so gilt $|\text{grad}(r) - \text{grad}(s)| \leq 1$ und alle Koeffizienten von r und s haben gleiches Vorzeichen.
(iii) Sei $f(z) = g(z) + az$ und g(z) regulär in $\{\infty\}$. Dann ist $f \in \mathbb{P}$ genau dann, wenn $g \in \mathbb{P}$ und $a \geq 0$.
(iv) $f = r/s \in \mathbb{P}$ genau dann, wenn
  (a) (r + s) hat keine NST in $\mathbb{C}_+$ und
  (b) Re $f(iy) \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$.

Symmetrieeigenschaften.

Für die Klassifikation von RKV mit symmetrischen Stabilitätsgebieten S_A oder S_{AN} ist es nützlich, innerhalb der Menge aller s-stufigen RKV $\mathbb{B}_s$ folgende Abbildungen zu betrachten (cf. Scherer-Türke [1983])

$$\Phi : \mathbb{B}_s \to \mathbb{B}_s : \beta \to \beta^* \quad \text{und}$$
$$\Psi : \mathbb{B}_s \to \mathbb{B}_s : \beta \to \beta^\tau \quad , \text{wobei} \tag{1.22}$$

das zu ß gespiegelte bzw. transponierte RKV β^* bzw. β^τ wie folgt definiert ist

$$\beta^* = (c^*, A^*, b^*) := (\mathbb{1} - Pc, P(\mathbb{1}\, b^T - A)P, Pb)$$
$$\beta^\tau = (c^\tau, A^\tau, b^\tau) := (\mathbb{1} - Pc, PB^{-1}A^TBP, Pb) \quad (b_i \neq 0,\ i=1,\ldots,s) \tag{1.23}$$

mit $P := \begin{pmatrix} & & 1 \\ & \iddots & \\ 1 & & \end{pmatrix} \in \mathbb{B}^{s\times s}$.

Φ und Ψ sind involutorische Bijektionen in $\mathbb{B}_s$. Bezeichnet man ein Verfahren β als vom Typ (1,m,n), wenn B(1), C(m) und D(n) (cf. (1.8)) erfüllt sind, so gilt (cf. Scherer-Türke[1983])

Lemma 1.7

Seien $1 \leq m,n \leq s$, $\max\{m,n\} \leq l \leq 2s$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent :

(i) β ist vom Typ (1,m,n) ;

(ii) β^* ist vom Typ (1,m,n) ;

(iii) β^T ist vom Typ (1,n,m) .

Die gespiegelten RKV sind bzgl. dem Typ invariant, während sich bei Transposition die Bedingungsgleichungen C(m) und D(n) vertauschen.

§ 2 Stabilitätsuntersuchungen mit V-Transformation

Für ein RKV mit paarweise verschiedenen Knoten ($c_i \neq c_j$, $i \neq j$) wird in diesem Paragraphen mittels einer Kongruenz-Transformation der Stabilitätsmatrix M aus (1.19) eine Grundform S hergeleitet. Als Transformations-Matrix verwenden wir die reguläre VanderMonde-Matrix V, welche mit den Stützstellen des RKV ß=[c,A,b] gebildet wird : $V = (c_i^{j-1})_{i,j=1}^{s}$ (cf. Burrage[1978b]). Die Spalten bzw. Zeilen der Grundform S hängen von der Gültigkeit der Gleichungs-Systeme C(.) bzw. D(.) (cf.(1.8)) in eindeutiger Weise ab (Satz 2.2). Anhand dieser Grundform S ist es nun möglich, die algebraische Stabilität des RKV ß sofort abzulesen (Satz 2.6(ii)). Auch umgekehrt kann mittels S, durch Rückführung der eingeführten Transformationen, ein algebraisch stabiles RKV vorgegebener Ordnung konstruiert werden (cf. Satz 2.6). Es zeigt sich weiter, daß alle algebraisch stabilen Verfahren (mit paarweise verschiedenen Stützstellen) auf diese Weise konstruiert werden können, sodaß hier von einer konstruktiven Charakterisierung gesprochen werden darf. Einige Beispiele am Ende des Paragraphen veranschaulichen obige Resultate.

Herleitung einer Grundform.

Gegeben sei ein RKV ß = [c,A,b] mit paarweise verschiedenen Knoten ($c_i \neq c_j$, $i \neq j$) der Ordnung p. Bildet man zu den Knoten c_i ($i=1,\dots,s$) die (reguläre) VanderMonde-Matrix

$$V := (c_i^{j-1})_{i,j=1}^{s} \quad , \tag{2.1}$$

so erhält man für die Stabilitätsmatrix $M = BA + A^TB - bb^T =$ $BC + C^TB$ (cf. (1.19)) mit C aus (1.6)

$$V^TM\,V = V^T(BC + C^TB)\,V = V^TBCV + (V^TBCV)^T \, . \tag{2.2}$$

Mit

$$S := V^TBCV \tag{2.3}$$

ergibt sich

$$V^TM\,V = S + S^T \, . \tag{2.4}$$

Die quadratische sxs-Matrix S wird im folgenden als Grundform des

RKV ß oder auch als Normalform bzgl. V von C bezeichnet. Aufgrund der Regularität der Transformations-Matrix V ist $M \geq 0$ äquivalent zur positiven Semi-Definitheit von $S + S^T$. Die Matrix S besitzt nun gegenüber C wesentliche Vorteile, um den Einfluß der Gleichungs-Systeme C(.) und D(.) eines RKV der Ordnung p auf die geshiftete Koeffizientenmatrix C zu demonstrieren.

Dazu werden zuerst, mit Hilfe obiger VanderMonde-Matrix V (cf.(2.1)) sowie den Teilmatrizen $V_r := (c_i^{j-1})_{i=1}^{s}\,{}_{j=1}^{r}$ $(1 \leq r \leq s)$, die Bedingungen B(.), C(.), D(.) und E(.,.) aus (1.8) matrizentheoretisch wie folgt geschrieben $(l,m,n,\eta,\xi \in \mathbb{N})$:

$$\begin{aligned} B(l) &: & V_l^T b &= (1,\tfrac{1}{2},\ldots,\tfrac{1}{l})^T \quad ; \\ C(m) &: & A\,V_m &= V\,J_m = C\,V_m \tilde{J}_m \quad ; \\ D(n) &: & V_n^T BA &= \tilde{J}_n (E_n^T - V_n^T C)\,B \quad ; \\ E(\eta,\xi) &: & V_\eta^T BA\,V_\xi &= \left(\frac{1}{r(r+q)}\right)_{r=1}^{\eta}\,{}_{q=1}^{\xi} \quad . \end{aligned} \tag{2.5}$$

Dabei sind $\tilde{J} := \mathrm{diag}(1,\frac{1}{2},\ldots,\frac{1}{s})$, $J := \left(\begin{array}{c|c} 0\ldots & 0 \\ \tilde{J} & \begin{smallmatrix}\vdots\\0\end{smallmatrix}\end{array}\right)$, $C := \mathrm{diag}(c_1,\ldots,c_s)$, $E := \mathbb{1}\,\mathbb{1}^T$; Index-Werte unter den Matrizen bedeuten die Gültigkeit für die ersten Spalten der betreffenden Matrix.

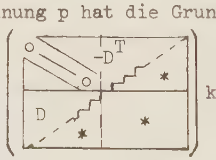
Man beachte, daß $V^T bb^T V = (V^T b)(V^T b)^T$ für $p \geq s$ eine Rang-1-Matrix mit den Elementen $(1/(rq))_{r,q=1}^{s}$ ist und $V^T b = V^T B \mathbb{1} = (V^T BV)_1$ gilt.

Setze $$k := \left[\frac{p-1}{2}\right] \quad , \tag{2.6}$$

wobei p die Ordnung des RKV ß und [x] die größte ganze Zahl bezeichnet, die kleiner oder gleich x ist.

Lemma 2.1

Für ein RKV der Ordnung p hat die Grundform $S = V^T BC\,V$ die Gestalt

S = 

. (2.7)

Beweis. Die Theoreme 1 und 2 von Butcher[1964a] liefern die Gültigkeit der Gleichungs-Systeme B(l) für $l \leq p$ und $E(\eta,\xi)$ für alle $\eta+\xi \leq p$

(cf.(2.5)). Damit gilt für alle $l+q \leq p$

$$(S + S^T)_{l,q} = (V^T M V)_{l,q}$$

$$= V_l^T BA\, V_q + V_l^T A^T B V_q - V_l^T b b^T V_q$$

$$= \frac{1}{l(l+q)} + \frac{1}{q(l+q)} - \frac{1}{lq} = 0 \quad .$$

Mit k aus (2.6) hat $S + S^T$ die Form $\begin{pmatrix} 0 & * \\ * & * \end{pmatrix} k$, woraus die behauptete Partitionierung für S folgt. □

Einfluß von C(m) und D(n) auf S.

Im folgenden Satz wird der Einfluß der Bedingungs-Gleichungen C(m) und D(n) auf die Spalten bzw. Zeilen der Grundform $S = V^T BC\, V$ gezeigt.

Satz 2.2

Gegeben sei ein RKV ß = [c,A,b] der Ordnung p mit paarweise verschiedenen Knoten. Seien s_{ql} reelle Zahlen mit

$$s_{ql} := \begin{cases} \dfrac{q-1}{2ql(q+l)} & \text{für } q+l \leq p \ , \qquad (2.8)' \\ \dfrac{1}{l}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{q+l-1} - \dfrac{1}{2q} \right) & \text{sonst} \ . \qquad (2.8)'' \end{cases}$$

(a) Für alle $m \leq k$ ist C(m) genau dann erfüllt, wenn

$$S = \left((s_{ql}) \Big|_m \ * \right) \quad \text{gilt.} \qquad (2.9)$$

(b) Für alle $n \leq k$ ist D(n) genau dann erfüllt, wenn

$$S = \begin{pmatrix} (s_{ql}) \\ * \end{pmatrix} n \quad \text{gilt.} \qquad (2.10)$$

Bemerkungen: (1) Für $q+l \leq p$ haben die Elemente s_{ql} antisymmetrischen Charakter, dh. es gilt $s_{ql} = -s_{lq}$ (cf. auch Lemma 2.1).
(2) Die ersten m Spalten bzw. die ersten n Zeilen der Grundform S sind durch C(m) bzw. D(n) bei vorgegebener QF [c,b] festgelegt. Ebenso wie für die Normalform $Y = X - \frac{1}{2} e_1 e_1^T$ von C bezüglich der Transformations-Matrix W (cf. Hairer-Wanner[1981]) kann ein analoges Verhalten der Spalten bzw. Zeilen von S auch für m,n mit $[(p-1)/2] < m,n \leq s$ gezeigt werden. Für das Ziel dieses

Paragraphen, algebraisch stabile RKV zu charakterisieren, reicht die Behauptung von Satz 2.2 in dieser Form aus.

(3) Die Ordnung einer der RKV der Ordnung p zugrunde liegenden QF kann durchaus höher als p sein ('maximal 2s'), muß aber mindestens p betragen (Theorem 1, Butcher[1964a]).

Beweis von Satz 2.2. Sei ß ein RKV der Ordnung p mit paarweise verschiedenen Knoten und damit regulärer VanderMonde-Matrix V. Sei m≠k. Nach (2.5) ist C(m) äquivalent zu

$$A\,V_m = \Gamma V_m \tilde{J}_m .$$

Damit gilt $U_m := V^T B A V_m = V^T B \Gamma V_m \tilde{J}_m = \left(\frac{1}{l}\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right)_{q=1\,l=1}^{s\quad m}$

$$= \begin{cases} B(p) & 1/(l(l+q)) \quad , \ l+q\le p \\ \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} & , \text{sonst} \end{cases} .$$

Also ist

$$S_m = U_m - \frac{1}{2} V^T b b^T V_m = \begin{cases} 1/(l(l+q)) - 1/(2lq), & l+q\le p \ , \\ \frac{1}{l}\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2ql} & , \text{sonst.} \end{cases}$$

$$(l=1,\dots,m;\ q=1,\dots,s)$$

$$= \begin{cases} \frac{q-1}{2lq(l+q)} & , \ q+l\le p \ \text{ und} \\ \frac{1}{l}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2q}\right) & \end{cases} \quad \begin{matrix} l=1,\dots,m \\ q=1,\dots,s \end{matrix} ,$$

$$= (s_{ql})_{l=1\,q=1}^{m\quad s} .$$

Für n≠k ist D(n) äquivalent zu (cf.(2.5))

$$V_n^T B A = \tilde{J}_n \left(E_n - \Gamma V_n \right)^T B \quad , \text{ wobei } E = (1)_{i,j=1}^{s}.$$

Damit erhält man

$$U_n^T = V_n^T B A V = \tilde{J}_n (E_n^T - V_n^T \Gamma) B V$$

$$= \tilde{J}_n E_n^T B V - \tilde{J}_n V_n^T \Gamma B V = \tilde{J}_n \mathbf{1}_n \mathbf{1}^T B V - (V^T B \Gamma V_n \tilde{J}_n)^T$$

$$= (V_n^T b)(V_n^T b)^T - \left(\frac{1}{q}\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right)_{q=1\,l=1}^{n\quad s}$$

$$= \begin{cases} 1/(ql) - 1/(q(q+l)) & , \ l+q\le p \\ \frac{1}{q}\left(\frac{1}{l} - \sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right) & , \text{sonst} \end{cases} .$$

Also ist

$$S_n^T = U_n^T - \frac{1}{2} V_n^T b b^T V = \begin{cases} 1(ql) - 1/(q(q+l)) - 1/(2ql), & q+l \leq p \\ \frac{1}{q}\left(\frac{1}{l} - \sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right) - \frac{1}{2ql}, & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(q=1,\ldots,n;\ l=1,\ldots,s)$$

$$= \begin{cases} \frac{q-l}{2ql(q+l)}, & q+l \leq p \text{ und} \\ \frac{1}{q}\left(\frac{1}{2l} - \sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right) & \text{sonst} \end{cases} \qquad \begin{matrix} q=1,\ldots,n \\ l=1,\ldots,s \end{matrix}$$

$$= (-s_{lq})_{q=1}^{n}{}_{l=1}^{s} .$$ □

Eine Schlüsselposition nimmt der erste Teil des folgenden Lemmas (cf. Hairer [1980]) ein. Es sichert, unabhängig von der Stufenzahl s, eine Mindestgenauigkeit der Zwischen-Approximationen Y_i (i=1,...,s) eines RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten. Aufgrund von Lemma 1.7 kann die Aussage des ersten Teiles für das RKV B auf das transponierte RKV B^T (cf.(1.23)) angewendet werden, woraus sich der zweite Teil des Lemmas ergibt.

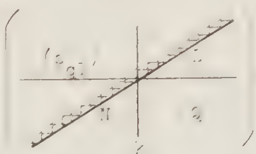
<u>Lemma 2.3</u>

Für ein s-stufiges RKV B der Ordnung p mit positiven Gewichten gilt

(i) B erfüllt C(k) mit $k = [(p-1)/2]$;

(ii) B erfüllt D(k') mit $k' := [(p'-1)/2]$, wobei p' die Ordnung des zu B transponierten RKV B^T ist.

Zusammen mit Lemma 2.1 und Satz 2.2 folgt für RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen eine Grundform S der Gestalt (k aus (2.6))

S = 

k . (2.[illegible])

Dabei sind $Q \in \mathbb{R}^{l \times l}$, l:= s-k und die Elemente der Dreiecksmatrix N

durch (2.8)'' für $(q,l)\in I_k$ mit $(I_0 := \emptyset)$

$$I_k := \{(i,j)\in\mathbb{N}\times\mathbb{N} \mid 1\le j\le k,\ k+1\le i\le s,\ i+j\ge 2k+2\} \tag{2.12}$$

gegeben. Die Elemente der Sektoren $(s_{q,l})$ und N sind bzgl. einer fest vorgegebenen RF (z.B.) somit feststehende Größen. Werden weitere Bedingungen an das Verfahren gestellt (wie z.B. algebraische Stabilität), so müssen auch die Elemente der Teilmatrix L ganz bestimmte Werte annehmen.

Lemma 2.4

Die Grundform S eines RKV ß der Ordnung p sei gegeben durch (2.11) mit k aus (2.6). Dann gilt unter der Bedingung C(k) (bzw. D(k)) : D(k) (bzw. C(k)) ist genau dann erfüllt, wenn

$$N + L^T = \underline{0} \quad . \tag{2.13}$$

Beweis. '=>': Seien C(k) und D(k) mit $k=[(p-1)/2]$ erfüllt. Da

$$C(k) \iff AV_k = \Gamma V\tilde{J}_k \quad \text{und}$$

$$D(k) \iff V_k^T BA = \tilde{J}_k(E_k^T - V_k^T\Gamma)B \ ,$$

ergibt sich $V_k^T BA\,V = \tilde{J}_k E_k^T BV - \tilde{J}_k V_k^T \Gamma BV$

$$= (V_k^T b)(V^T b)^T - V_k^T A^T BV = V_k^T(bb^T - A^T B)V,$$

also $V_k^T M V = V_k^T BA + A^T B - bb^T V = \underline{0}^T = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \\ * & \cdots & * \end{pmatrix} k$.

Wegen $M = M^T$ folgt

$$V^T M V = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} = S + S^T = \begin{pmatrix} 0 & \\ & * \end{pmatrix} k \ ,$$

und somit $N + L^T = \underline{0}$.

'<=': Sei $N + L^T = \underline{0}$ und C(k) bzw. D(k) erfüllt. Dann gilt $L = -N^T$ bzw. $N = -L^T$, also hat L bzw. N gerade die Elemente

$$\frac{1}{q}\left(\frac{1}{2l} - \sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1}\right) \qquad \text{bzw.} \quad \frac{1}{l}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2q}\right) \quad .$$

Aufgrund von Satz 2.2 folgt nun die Behauptung. □

Charakterisierung algebraisch stabiler RKV.

Wegen

$$V^T M V = S + S^T = \left(\begin{array}{c|c} \bigcirc & 0 \\ \hline 0 & N^T+L \\ & N+L^T \quad Q+Q^T \end{array}\right) k$$

erkennt man für ein algebraisch stabiles RKV ß der Ordnung p, daß zusätzlich zu C(k) (positive Gewichte, k aus (2.6)) auch D(k) und damit $N + L^T = \underline{0}$ notwendig ist. Bevor wir eine vollständige Charakterisierung algebraisch stabiler RKV der Ordnung p geben (Satz 2.6), muß noch sicher gestellt werden, daß durch S aus (2.11) mit $L = -N^T$ tatsächlich ein Verfahren der Ordnung p konstruiert werden kann.

Lemma 2.5

Sei [c,b] eine QF der Ordnung p (Exaktheitsgrad p-1) mit $c_i \neq c_j$, $i \neq j$, und $b_i \neq 0$ $(i=1,\ldots,s)$. Mit

$$A := (V^T E)^{-1} S V^{-1} + \frac{1}{2} \mathbb{1} b^T \quad \text{und}$$

$$S := \left(\begin{array}{c|c} (s_{ql}) & -N^T \\ \hline N & Q \end{array}\right) k \quad , \; Q \in \mathbb{R}^{(s-k)^2} \text{ beliebig} , \qquad (2.\ldots)$$

$$s_{ql} := (q-1)/(2q(q+1)) \quad , \; q+l \leq p \quad ,$$

$$N := \left(\frac{1}{l} \left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2q} \right) \right)_{(q,l) \in I_k}$$

I_k aus (2.12)

ist ß = [c,A,b] ein RKV der Ordnung p .

Beweis. Ist p ungerade, so folgt die Behauptung sofort aus Theorem 7 von Butcher [1964a], da nach Konstruktion (2.14) und Satz 2.2 die Gleichungs-Systeme C(k) und D(k) erfüllt sind. Ist p gerade, so ist $q_{11} = (Q)_{11} = 0$ (cf. Lemma 2.1 oder Satz 2.2), also E(k+1,k+1) erfüllt. Damit gelten auch in diesem Fall alle notwendigen Ordnungsbedingungen für das konstruierte RKV ß. □

Man beachte, daß die Unter-Matrix $Q \in \mathbb{R}^{l \times l}$ (l=s-k) in der Konstruktionsvorschrift (2.14) aus Lemma 2.5 frei wählbar ist. Sie stellt

somit zusätzlich zu der vorgegebenen QF [c,b] ein Parameter-Reservoir dar. Gelegentlich wird Q als Residuenmatrix der Grundform S bzgl. der V-Transformation bezeichnet ($Q=Q_V$).
Ist die Ordnung eines RKV gerade, so ist $q_{11} = 0$, während die übrigen Elemente der ersten Zeile und Spalte von Q von 0 verschieden sein können.
Wir sind nun in der Lage, das Haupt-Resultat dieses Paragraphen zu formulieren, nämlich eine konstruktive Charakterisierung von algebraisch stabilen RKV der Ordnung p.

Satz 2.6

Sei [c,b] eine QF der (Mindest-) Ordnung p mit $c_i \neq c_j$, $i \neq j$, und positiven Gewichten. Dann sind alle algebraisch stabilen RKV der Ordnung p mit der zugrunde liegenden QF [c,b] gegeben durch

$$ß = [c,A,b] \quad \text{mit} \tag{2.15}$$

(i) A bzw. S aus Lemma 2.5 und

(ii) $$Q + Q^T \geq 0 \quad . \tag{2.16}$$

Durch Variation der dem RKV zugrunde liegenden QF [c,b] ergeben sich verschiedene Klassen von Verfahren u.U. mit höherer Ordnung (cf. Beispiel (2), S. -24-). Eine Tabelle der Werte s_{ql} mit $q,l = 1,..,10$ befindet sich im Anhang A1. .

Beweis. Aufgrund der positiven Gewichte von ß=[c,A,b] folgt aus Lemma 2.3 die Gültigkeit von C(k). Zusammen mit $M \geq 0$, also insbesondere $N + L^T = \underline{0}$, folgt nach Lemma 2.4 D(k). Damit ist

$$V^T M V = S + S^T = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & Q+Q^T \end{array}\right)$$

genau dann positiv semi-definit, wenn $Q + Q^T \geq 0$ ist. Lemma 2.5 sichert ferner die Ordnung p des RKV ß = [c,A,b] . □

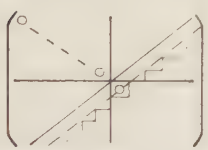
Da jedem RKV der Ordnung p eine QF der Mindest-Ordnung p zugrunde liegt, können mittels der Konstruktionsvorschrift (2.15) und der Nebenbedingung (2.16) alle algebraisch stabilen RKV der Ordnung p auf diese Weise konstruiert werden. Die Bedingung C(k) ist für Verfahren mit positiven Gewichten von zentraler Bedeutung. Sie legt

die ersten k Spalten der Grundform S fest, sodaß aufgrund dem antisymmetrischen Charakter der Elemente von (s_{ql}) wegen $M \geq 0$ (bzw. $V^T M V = S + S^T \geq 0$) auch die entsprechenden Zeilen von S festgelegt werden. Aus der Positivität der Gewichte kann dagegen nicht notwendigerweise D(k) gefolgert werden, wie die Klasse der transformierten SINGLY-RKV (Burrage[1979]) zeigt. Nicht-algebraisch stabile RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten verletzen demnach entweder D(k) oder $Q+Q^T \geq 0$ oder auch beide Bedingungen.

Weitere Bemerkungen.

(1) Die Grundform $S=V^TBCV$ hat für gerade bzw. ungerade Ordnung p eine unterschiedliche Sektoren-Aufteilung :

p gerade (p = 2k+2) p ungerade (p = 2k+1)

$S =$  $S =$ (2.17)

Für gerades p und positiv semi-definiter Matrix $Q + Q^T$ hat Q wegen $q_{11}=[Q]_{11}=0$ die restringierte Darstellung

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & -u_2 & \cdots & -u_l \\ u_2 & & & \\ \vdots & & \hat{Q} & \\ u_l & & & \end{pmatrix} \qquad (2.18)$$

mit $l=s-k$, $\hat{Q} \in \mathbb{R}^{(l-1)\times(l-1)}$, $\hat{Q} + \hat{Q}^T \geq 0$, $u_i \in \mathbb{R}$ $(i=2,\ldots,l)$.

(2) Die Konstruktion eines RKV ß der Ordnung p mittels der Grundform S (cf. Lemma 2.5) beruht auf einer vorgegebenen QF mit paarweise verschiedenen Stützstellen (Regularität von V) und nichtverschwindenden Gewichten (Regularität von B). Setzt man sogar positive Gewichte voraus (cf. Satz 2.6), so kann die symmetrische und positiv definite Matrix $V^TM\,V$ Cholesky-zerlegt werden, dh. es existiert eine reguläre (obere) Dreiecks-Matrix R mit $R^TR = V^TB\,V$. Mit $W := VR^{-1}$ ergibt sich $W^TB\,W = I$. Die Spalten von $W = W(c_1,\ldots, c_s)$ stellen damit ein diskretes Orthonormalsystem bzgl. des Skalarprodukt x^TBy dar. Maximale Ordnung ergibt sich dann für die Legendre-Polynome, wodurch die Elemente der Matrix R explizit bestimmt

werden können (cf. Lemma 3, Hairer-Wanner [1981]).
Die Normalform Y von C bzgl. der Transformationsmatrix W ($Y=W^TBCW$) enthält aufgrund der Orthogonalitätseigenschaft der Spalten von W zahlreiche 0-Elemente, sodaß sich bei der Konstruktion von (algebraisch stabilen) RKV der Ordnung p ((2.14)-(2.16)) Vereinfachungen ergeben. Ferner kann die W-Transformation auch auf RKV angewand werden, deren zugrunde liegende QF gleiche Stützstellen enthält. Dafür werden Auswertungen von Legendre-Polynomen an den Stützstellen c_i (i=1,..,s) erforderlich.

(3) Algebraisch stabile RKV müssen notwendigerweise zumindest D(k) mit k aus (2.6) erfüllen. Damit sind sie insbesondere ordnungsinvariant bzgl. Transposition (Lemma 1.7). Ferner gilt wegen Rang(M) = Rang($Q+Q^T$) und (2.18)

$$\text{Rang}\ (M) \leq \left[\frac{2s-p+1}{2}\right] \quad . \tag{2.19}$$

Gegenüber der allgemeinen Schranke von Crouzeix [1979] bedeutet (2.19) für $p\leq 2s-2$ eine deutliche Verschärfung. Man beachte, daß die Verfahrens-Klassen $III_A(s)$ und $III_B(s)$ (cf. Ehle [1969]) der Ordnungen $p=2s-2$ die Bedingung (2.19) nicht erfüllen, also nicht algebraisch stabil sein können. Das Überprüfen der Schranke (2.19) stellt einen ersten einfachen Test für den Nachweis der (nichtlinearen) algebraischen Stabilität eines RKV ß dar.

(4) Für $p<s$ ist die Rang-1-Matrix $H = V^TbbV = (V^Tb)(V^Tb)^T$ i.A. nicht mehr identisch mit $(1/(rq))_{r,q=1}^{s}$. Die Partitionierung der Grundform S nimmt in diesem Fall folgende Gestalt an

$$S = \left(\begin{array}{c|c} (s_{ql}) & L \\ \hline N & Q \end{array}\right) \quad . \tag{2.20}$$

Die Elemente der Teilmatrizen N und L lauten, falls C(**k**) bzw. D(k) erfüllt sind (cf. Satz 2.2) :

$$N = \begin{array}{|c|}\hline N_1 \\ \hline N_2 \\ \hline \end{array} : \begin{cases} N_1 = \left[\frac{1}{1}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2q} \right) \right]_\sim \\ N_2 = \left[\frac{1}{1}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j \left(c_j^{l+q-1} - \frac{1}{2} c_j^{q-1} \right) \right) \right]_\sim \end{cases} ; \qquad (2.21)$$

$$L = \begin{array}{|c|c|}\hline L_1 & L_2 \\ \hline \end{array} : \begin{cases} L_1 = \left[\frac{1}{q}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j c_j^{q+l-1} - \frac{1}{2l} \right) \right]_\sim \\ L_2 = \left[\frac{1}{q}\left(\sum_{j=1}^{s} b_j \left(c_j^{q+l-1} - \frac{1}{2} c_j^{l-1} \right) \right) \right]_\sim \end{cases} .$$

Die Tilde nach den eckigen Klammern deutet eine den Strukturen der Matrizen N_i bzw. L_i (i=1,2) entsprechende Indizierung an. N und L sind auch hier durch die gewählte QF [c,b] festgelegt.

Beispiele.

(1) Die auf der 4-stufigen Lobatto-QF beruhenden III(4)- bzw. $III_C(4)$-Verfahren von Butcher[1964b] bzw. Chipman[1971] haben die Eigenschaften

$$s=4 \ , \ p=6 \ , \ k=2 \ , \ C(3) \ , \ D(3)$$

und besitzen die Grundform

$$S = \left[\begin{array}{cc|cc} 0 & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} & -\frac{3}{40} \\ \frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{60} & -\frac{1}{48} \\ \hline \frac{1}{12} & \frac{1}{60} & 0 & -\frac{11}{1800} \\ \frac{3}{40} & \frac{1}{48} & \frac{11}{1800} & \alpha \end{array}\right] ,$$

wobei $\alpha = \begin{cases} -1/7200 \\ +1/7200 \end{cases}$ für das $\begin{cases} \text{III(4)-} \\ \text{III}_C\text{(4)-} \end{cases}$ Verfahren .

$V^T M V = S + S^T = \begin{pmatrix} 0 & \\ & 2\alpha \end{pmatrix}$ ist für das $III_C(4)$-Verfahren positiv semidefinit (und damit ß algebraisch stabil), jedoch für das III(4)-Verfahren negativ semidefinit. Analoges Verhalten kann für die beiden Klassen III(s) und $III_C(s)$ gezeigt werden, wobei $\alpha = \alpha(s)$.

(2) Die Menge aller 2-stufigen RKV der Ordnung p=3 basierend auf der Radau-QF $[c,b] = [(0,2/3)^T,(1/4,3/4)^T]$ lassen sich durch den Grundform-Ansatz

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{12} \\ \frac{1}{12} & q \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad q \in \mathbb{R} \tag{2.22}$$

konstruieren. Nach Lemma 2.5 ergibt sich die RK-Matrix A zu

$$A = (V^T B)^{-1} S V^{-1} + \frac{1}{2} \mathbb{1} b^T = \begin{pmatrix} 9q + \frac{1}{8} & -(9q + \frac{1}{8}) \\ \frac{7}{24} - 3q & 3q + \frac{3}{8} \end{pmatrix},$$

sodaß $\mathcal{B} = [c,A,b]$ die gesuchte Verfahrensmenge darstellt. Für $q := -1/72$ bzw. $q := +1/72$ erhält man das $I(2)$- bzw. das $I_A(2)$-Verfahren von Butcher[1964b] bzw. Ehle[1969].

Bzgl. der Gauß-QF $[c,b] = [((3-\sqrt{3})/6,(3+\sqrt{3})/6)^T,(1/2,1/2)^T]$ ergibt sich aus (2.22) die Verfahrens-Schar $\mathcal{B} = [c,A,b]$ der Ordnung p=3 mit

$$A = (V^T B)^{-1} S V^{-1} + \frac{1}{2} \mathbb{1} b^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + 6q & \frac{3-2\sqrt{3}}{12} - 6q \\ \frac{3+2\sqrt{3}}{12} - 6q & \frac{1}{4} + 6q \end{pmatrix} .$$

Für $q := 0$ erhält man das G(2)-Verfahren (Butcher[1964a]) der Ordnung 4 (maximale Ordnung).

(3) Für das klassische RKV (cf. Grigorieff[1972],S.19) mit s=p=4, k=1, C(1) und D(1) ergibt sich die Grundform

$$S = \left[\begin{array}{c|ccc} 0 & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} \\ \hline \frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{48} & -\frac{1}{32} \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{48} & \frac{1}{288} & \frac{1}{64} \\ \frac{1}{12} & \frac{1}{32} & \frac{1}{192} & \frac{1}{128} \end{array}\right] .$$

Da $c = (0,\frac{1}{2},\frac{1}{2},1)^T$, die Knoten also nicht paarweise verschieden sind, läßt sich zwar die Grundform S aufstellen, jedoch die RK-Matrix A über die Konstruktions-Vorschrift aus Lemma 2.5 (oder Satz 2.6) nicht erzeugen.

Ferner führt das 4-stufige Gill-Verfahren (cf. Grigorieff[1972],S.19)

mit ebenfalls p=s=4 und k=1 auf dieselbe Grundform S. Beide Verfahren unterscheiden sich somit nur bzgl. der Wahl der QF [c,b]. Schließlich beachte man

$$V^T M V = S + S^T = \begin{pmatrix} o & o & o & o \\ o & o & o & o \\ o & o & \times & \times \\ o & o & \times & \times \end{pmatrix} \quad , \text{ bzw.}$$

$$W^T M W = Y + Y^T = \begin{pmatrix} o & o & o & o \\ o & o & o & \times \\ o & o & \times & o \\ o & \times & o & \times \end{pmatrix} \quad ,$$

wobei Y die Normalform von C bzgl. der Transformations-Matrix $W = VR^{-1}$ (cf. Bemerkung (2), S.-21-). Aus der zweiten Darstellung ist sofort die nicht-positive Semidefinitheit von M zu erkennen, allerdings ordnet die Kongruenz-Transformation mit V die Parameter der Stabilitätsmatrix M formal dichter.

(4) Das transformierte SINGLY(5)-Verfahren von Burrage[1979] mit s=p=5, k=2, C(4), D(0) und dem 5-fachen Eigenwert $\lambda = 0.5$ von A, beruhend auf der 5-stufigen Lobatto-QF (p_{QF}=8), ergibt

$$S = \left(\begin{array}{cc|ccc} 0 & -1/12 & -1/12 & -3/40 & -1/10 \\ 1/12 & 0 & -1/60 & -1/48 & -1/120 \\ \hline 1/12 & 1/60 & 0 & -3/140 & 9/280 \\ 3/40 & 1/48 & 1/168 & 0 & .0464286 \\ 1/15 & 3/140 & 1/120 & .0027849 & .0507058 \end{array}\right) .$$

Die ersten drei Elemente der letzten Spalte von S (s_{15}, s_{25}, s_{35}) stimmen nicht mit den geforderten Werten (cf. letzte Zeile von S) überein, sodaß das Gleichungssystem D(n) für kein $n \in \mathbb{N}$ erfüllt ist (D(0), cf. Satz 2.2).

Im Anhang A6. ist das Protokoll eines ALGOL-60-Programms aufgeführt, das zu einem s-stufigen RKV ß = [c,A,b] die Grundform S, sowie die Größen m,n der Bedingungs-Gleichungen C(m) bzw. D(n) bestimmt; daran schließen sich weitere Rechenbeispiele an.

§ 3 Charakterisierung A-verträglicher Approximationen an exp(z).

In diesem Paragraphen wird eine neue Charakterisierung der A-Verträglichkeit der Stabilitätsfunktion W eines s-stufigen RKV ß angegeben (Satz 3.2). Die Stabilitätsfunktion W stellt eine rationale Approximation an exp(z) der (Mindest-) Ordnung p dar (cf. §1). Diese werden nun, mittels Kettenbruchentwicklung einer modifizierten Stabilitätsfunktion θ, durch eine (2s-p)-parametrige (rationale) Residuenfunktion χ_k charakterisiert (Satz 3.4). Damit ist einerseits eine sehr einfache notwendige und hinreichende Bedingung für die A-Verträglichkeit von W möglich (Satz 3.8) und andererseits kann eine Darstellung von θ bzw. χ_k mittels einer Matrix $\tilde{Y}$ gezeigt werden, die eine ähnliche Struktur wie die aus der Grundform S (cf.(2.3)) abgeleitete Normalform Y (§ 2, S.22) besitzt (Satz 3.7). Dadurch läßt sich ein formal direkter Vergleich des A- und algebraische Stabilitätsbegriffes herleiten (§ 4).
Weiter werden Bedingungen bzgl. der Residuenfunktion χ_k angegeben, die notwendig und hinreichend für die A-Verträglichkeit der durch sie erzeugten Approximationen an exp(z) sind (Satz 3.14, Korollar 3.15).

Modifizierte Stabilitätsfunktionen

Sei ß = [c,A,b] ein RKV der Ordnung p. Die zugehörige Stabilitätsfunktion ist gegeben durch (cf. (1.15))

$$W(z) = 1 + z\, b^T (I - zA)^{-1} \mathbb{1} \tag{3.1}$$

für alle z mit $1/z \notin \mathrm{spec}(A)$. Sie stellt eine Approximation an exp(z) der (Mindest-) Ordnung p dar. Mit $C = A - \frac{1}{2}\mathbb{1}\, b^T$ (cf. (1.6)) betrachte man die (rationalen) Funktionen

$$\Psi(z) := z\, b^T (I - zC)^{-1} \mathbb{1} \quad \text{bzw.} \tag{3.2}$$

$$\theta(\lambda) := b^T (C + \lambda I)^{-1} \mathbb{1} \tag{3.3}$$

für alle z mit $1/z \notin \mathrm{spec}(C)$ bzw. $\lambda \notin \mathrm{spec}(-C)$.

Lemma 3.1

Zwischen der Stabilitätsfunktion W eines RKV ß=[c,A,b] und den Funktionen Ψ und θ aus (3.2), (3.3) besteht folgender Zusammenhang :

$$\text{(i)}\quad W(z) = \left[1 + \frac{1}{2}\Psi(z)\right]\left[1 - \frac{1}{2}\Psi(z)\right]^{-1}\ ; \tag{3.4}$$

$$\text{(ii)}\quad \theta(\lambda) = -\Psi(-\frac{1}{\lambda})\ . \tag{3.5}$$

Ψ und θ werden als modifizierte Stabilitätsfunktionen des RKV $\mathcal{B}$ bezeichnet. Wegen $\Psi(z) = 2[W(z)-1][W(z)+1]^{-1}$ (für alle zulässigen $z \in \mathbb{C}$) kann Ψ als Cayley-Transformierte von W angesehen werden. Ferner ist $\Psi(z)$ eine Approximation an $2\tanh(\frac{z}{2})$ der (Mindest-) Ordnung p, falls auch $W(z)$ eine Approximation dieser Ordnung an $\exp(z)$ ist.

Beweis. Für alle z mit $1/z \notin \mathrm{spec}(C)$ ist $(I-zC)$ regulär. Bezeichnet $A^* := \mathbb{1}b^T - A$ die zu A gespiegelte (cf. (1.23)), ungeordnete RK-Matrix, so ergibt sich für W aus (3.1)

$$W(z) = 1 + zb^T(I - zA)^{-1}\mathbb{1} = \frac{|I + zA^*|}{|I - zA|} = \frac{|(I - zC) + z\mathbb{1}b^T/2|}{|(I - zC) - z\mathbb{1}b^T/2|}$$

$$= \frac{|I - zC|(1 + \frac{1}{2}zb^T(I - zC)^{-1}\mathbb{1})}{|I - zC|(1 - \frac{1}{2}zb^T(I - zC)^{-1}\mathbb{1})} = \frac{1 + \frac{1}{2}\Psi(z)}{1 - \frac{1}{2}\Psi(z)}\ .$$

Ferner ist für alle $\lambda \notin \mathrm{spec}(-C)$

$$\theta(\lambda) = b^T(C + \lambda I)^{-1}\mathbb{1} = -(-\frac{1}{\lambda})\, b^T(I - (-\frac{1}{\lambda})C)^{-1}\mathbb{1} = -\Psi(-\frac{1}{\lambda})\ . \quad \square$$

Eine Charakterisierung A-stabiler RKV $\mathcal{B}$ bzw. A-verträglicher Approximationen an $\exp(z)$ liefert nun der folgende Satz.

Satz 3.2

Das s-stufige RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$ ist genau dann A-stabil, wenn $\theta \in \mathbb{P}$. Dabei bezeichnet $\mathbb{P}$ die Menge aller reell-positiven Funktionen (cf. Definition 1.5).

Beweis. Aufgrund von Lemma 3.1 (i) ist $\mathcal{B}$ genau dann A-stabil, wenn $\mathrm{Re}\,\Psi(z)<0$ für alle $z \in \mathbb{C}_- := \{z \in \mathbb{C} \mid \mathrm{Re}(z)<0\}$. Die Abbildung $z \to -\frac{1}{z}$ transformiert $\mathbb{C}_-$ bijektiv auf $\mathbb{C}_+ := \{z \in \mathbb{C} \mid \mathrm{Re}(z)>0\}$, so daß sich daraus für $\theta(\lambda) = -\Psi(-\frac{1}{\lambda})$ die Behauptung ergibt. $\square$

Der modifizierten Stabilitätsfunktion θ aus (3.3) kommt im folgenden eine zentrale Bedeutung zu. Bevor wir eine weitere Darstellung von θ angeben, falls die Gewichte der zugrunde liegenden QF $[c,b]$ eines

RKV positiv sind, sollen einige vergleichende Eigenschaften von W und θ zusammengestellt werden.

$W(z)$ aus (3.1)	$\theta(\lambda)$ aus (3.3)
$\|W(z)\| < 1 \quad (z \in \mathbb{C}_-)$	$\mathrm{Re}\,\theta(\lambda) > 0 \quad (\lambda \in \mathbb{C}_+)$
$\|W(z)\| \equiv 1$	$\mathrm{Re}\,\theta(\lambda) \equiv 0$
$W(z) \to \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad (\mathrm{Re}(z) \to -\infty)$	$\mathrm{Re}\,\theta(\lambda) \to \begin{cases} 0 \\ 2 \\ \infty \end{cases} \quad (\mathrm{Re}(\lambda) \to 0)$
Approximation an $\exp(z)$	Approximation an $2\tanh(\frac{1}{2\lambda})$.

Lemma 3.3

Für ein s-stufiges RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$ der Ordnung p (≥ 1) mit positiven Gewichten b_i ($i=1,..,s$) hat die modifizierte Stabilitätsfunktion θ aus (3.3) die Darstellung ($k = \lceil (p-1)/2 \rceil$)

$$\theta(\lambda) = \left[(Y + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = |Y + \lambda I|^{*}/|Y + \lambda I| \tag{3.6}$$

mit $\quad Y := W^T B C W \,, \tag{3.7}$

$$W := \left[(p_{j-1}(c_i))_{i=1}^{s}{}_{j=1}^{k+1} \,\middle|\, *\right] \in \mathbb{R}^{s\times s}, \tag{3.8}$$

$$W^T B W = I \,, \tag{3.8}'$$

$p_l(t)$ ist l-tes, auf $[0,1]$ orthonormiertes Legendre-Polynom, $|D|^{*}$ erste Hauptunterdeterminante von D.

Y aus (3.7) ist identisch mit der Normalform von C bzgl. der Transformationsmatrix W (cf. § 2, S.22). Die Darstellung (3.6) folgt sofort aus (3.3) aufgrund der Eigenschaft (3.7). Mit $q := k+1 = \lceil (p+1)/2 \rceil$ gilt wegen der Orthonormalität der Legendre-Polynome für

$$\hat{W} := (p_{j-1}(c_i))_{i,j=1}^{s} \quad :$$

$$D := \hat{W}^T B \hat{W} = \left(\begin{array}{c|c} I_q & 0 \\ \hline 0 & D_{s-q} \end{array}\right) \quad . \tag{3.9}$$

Ist $[c,b]$ eine positive QF ($b_i > 0$, $i=1,..,s$), so ist D_{s-q} positiv definit. Also existiert eine Matrix W, deren erste $q=k+1$ Spalten

mit denen von $\hat{W}$ identisch sind, so daß $\hat{W}^T B \hat{W} = I$ erfüllt ist. Daraus ergibt sich eine zusätzliche Ähnlichkeit der Matrizen C und Y (cf. (3.7)).

Liegt dem RKV ß keine positive QF zugrunde, so ist D aus (3.9) nicht positiv definit. Für $b_i \neq 0$ $(i=1,\ldots,s)$ kann jedoch folgende Darstellung für θ gezeigt werden

$$\theta(\lambda) = \left[(\hat{Y}D^{-1} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} \tag{3.10}$$

mit $\hat{Y} := \hat{W}^T B C \hat{W}$ und $\hat{W}$ bzw. D aus (3.9).

Die ersten k+1 Spalten von $\hat{Y}D^{-1}$ sind mit denen von Y aus (3.7) identisch.

<u>Kettenbruchentwicklung von θ</u>

Ist ß=[c,A,b] ein RKV der Ordnung p (≥1), so ist θ aus (3.3) (cf. auch (3.6)) eine rationale Funktion $\theta = g/f$ in λ mit $\mathrm{grad}(g) \leq s-1$ und $\mathrm{grad}(f) \leq s$. Rationale Funktionen lassen sich ferner in endliche J-Kettenbrüche der Länge kleiner oder gleich s entwickeln (Perron [1957], §30).

<u>Satz 3.4</u>

Die modifizierte Stabilitätsfunktion θ eines RKV ß der Ordnung p besitzt eine endliche Kettenbruchentwicklung

$$\theta(\lambda) = \frac{1|}{|\lambda} + \frac{\xi_1^2|}{|\lambda} + \ldots + \frac{\xi_{k-1}^2|}{|\lambda} + \chi_k(\lambda) =: \mathop{\Phi}_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda) \tag{3.11}$$

mit der Residuenfunktion

$$\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \cdot \frac{g^*(\lambda)}{f^*(\lambda)} = \xi_k^2 \cdot \frac{\sum_{i=0}^{s-k-1} g_i \lambda^i}{\sum_{i=0}^{s-k} f_i \lambda^i}, \tag{3.12}$$

wobei $k = [(p-1)/2]$,

$\xi_0^2 := 1$, $\xi_i^2 := [4(4i^2-1)]^{-1}$ $(i=1,\ldots,k)$, $f_{s-k} := g_{s-k-1} := 1$.

<u>Korollar 3.5</u>

Die Approximationsordnung der Stabilitätsfunktion θ(λ) an $2\tanh(\frac{1}{2\lambda})$ ist genau dann gerade, wenn für die Kettenbruchentwicklung von θ aus Satz 3.4 gilt

$$f_{s-k-1} = g_{s-k-2} . \tag{3.13}$$

Bemerkung. Bzgl. der Konstruktion von Approximationen an $\tanh(\frac{1}{2\lambda})$ bzw. an $\exp(z)$ durch Kettenbruchentwicklung ist die Tatsache von Vorteil, daß die Residuenfunktion $\chi_k = \xi_k^2 g^*/f^*$ wegen $f_{s-k} = g_{s-k-1} = 1$ (normierte Polynome) sich um eine Stufe weiterentwickeln läßt :

$$\chi_k(\lambda) = \frac{\xi_k^2}{\lambda} + R_{k+1}(\lambda)$$

mit $R_{k+1}(\lambda) := [f^*(\lambda) - \lambda g^*(\lambda)]/g^*(\lambda)$

$$= \frac{(f_{s-k-1}-g_{s-k-2})\lambda^{s-k-1} + \ldots\ldots + (f_1 - g_o)\lambda + f_o}{1\cdot\lambda^{s-k-1} + \ldots\ldots + g_1\lambda + g_o} \qquad (3.14)$$

$$=: u(\lambda)/v(\lambda) \in \mathcal{R}_{s-k-1,s-k-1} .$$

Dabei ist $\mathcal{R}_{m,n}$ die Menge der rationalen Funktionen mit Zähler- bzw. Nennergrad kleiner oder gleich m bzw. n und zu 1 normiertem Höchstkoeffizient von v. Man erhält somit θ in der Form

$$\theta(\lambda) = \underset{i=o}{\overset{k}{\phi}} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + R_{k+1}(\lambda) \quad \text{mit } R_{k+1} = u/v \text{ aus (3.14).} \qquad (3.15)$$

Beweis von Satz 3.4. Nach Voraussetzung ist $\theta(\lambda) = g(\lambda)/f(\lambda)$ eine Approximation an $\tanh(1/2\lambda)$ der Ordnung $p \geq 1$ aus $\mathcal{R}_{s-1,s}$. Zu zeigen ist, daß jede solche Approximation an $t(\lambda) := 2\tanh(1/2\lambda)$ durch eine Kettenbruchentwicklung der Form

$$\theta(\lambda) = \Phi_{i=o}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda) =: (\Phi_{k-1} + \chi_k)(\lambda)$$

mit den beschriebenen Bedingungen an χ_k darstellbar ist. Mittels bekannter Rekursionsformeln für Partial-Zähler und -Nenner von Kettenbrüchen (cf. Perron[1957], Brezinski[1980]) läßt sich θ als rationale Funktion darstellen

$$\theta(\lambda) = \frac{\Delta_k^*(\lambda) + \Delta_{k-1}^*(\lambda)\,\chi_k(\lambda)}{\phi_k^*(\lambda) + \phi_{k-1}^*(\lambda)\,\chi_k(\lambda)} . \qquad (3.16)$$

Dabei genügen die Polynome Δ_n^* und ϕ_n^* den Rekursionsformeln ($n \geq 1$)

$$\Delta_{n+1}^*(\lambda) = \lambda\,\Delta_n^*(\lambda) + \xi_n^2\,\Delta_{n-1}^*(\lambda) , \quad \Delta_1^* = 1 , \quad \Delta_o^* = 0 ;$$

$$\phi_{n+1}^*(\lambda) = \lambda\,\phi_n^*(\lambda) + \xi_n^2\,\phi_{n-1}^*(\lambda) , \quad \phi_1^* = \lambda , \quad \phi_o^* = 1 . \qquad (3.17)$$

Die Polynome Δ^*_{k+1} bzw. ϕ^*_{k+1} sind Näherungs-Zähler bzw. -Nenner des ungestörten Kettenbruches $\Phi_k = \Phi_{i=0}^{k} \xi_i^2/\lambda$ und $\Delta_n^{**}(\lambda)/\phi_n^{**}(\lambda) := \lambda^{-n}\Delta_n^*(\lambda)/\lambda^{-n}\phi_n^*(\lambda)$ bilden diagonale Padé-Approximationen an $t(\lambda)$ der Ordnung $2n$:

$$\Delta_n^{**}(\lambda) - t(\lambda)\,\phi_n^{**}(\lambda) = (-1)^{n+1} K_n \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{2n+1} + O\left(\left(\frac{1}{\lambda}\right)^{2n+3}\right) \qquad (3.18)$$

für alle $n \geq 0$ mit $K_n := (n!)^2/((2n)!(2n+1)!) = \prod_{i=1}^{n} \xi_i^2$. (3.19)

Mit $\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \cdot \frac{g^*(\lambda)}{f^*(\lambda)} = \xi_k^2 \cdot \frac{g^{**}(\lambda)\,\lambda^{s-k-1}}{f^{**}(\lambda)\,\lambda^{s-k-1}}$ erhält man

$$\theta(\lambda) = \frac{\Delta_k^{**}(\lambda)\, f^{**}(\lambda) + \xi_k^2\, \Delta_{k-1}^{**}(\lambda)\, g^{**}(\lambda)/\lambda}{\phi_k^{**}(\lambda)\, f^{**}(\lambda) + \xi_k^2\, \phi_{k-1}^{**}(\lambda)\, g^{**}(\lambda)/\lambda} = \frac{\bar{g}(\lambda)}{\bar{f}(\lambda)} \quad . \qquad (3.20)$$

Daraus folgt mit $u_{s-k-1} := (f_{s-k-1} - g_{s-k-2})$

$$\begin{aligned}
\bar{g}(\lambda) - t(\lambda)\,\bar{f}(\lambda) &= f^{**}(\lambda)\cdot\left[\Delta_k^{**}(\lambda) - t(\lambda)\,\phi_k^{**}(\lambda)\right] \\
&\quad + \xi_k^2\, g^{**}(\lambda)/\lambda \cdot \left[\Delta_{k-1}^{**}(\lambda) - t(\lambda)\,\phi_{k-1}^{**}(\lambda)\right] \\
&\overset{(3.18)}{=} (-1)^{k+1} K_k\, u_{s-k-1} \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{2k+2} + (-1)^k (K_{k+1} - K_k u_{s-k-2}) \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{2k+3} \\
&\quad + O\left(\left(\frac{1}{\lambda}\right)^{2k+4}\right) \\
&= O\left(\left(\frac{1}{\lambda}\right)^{p+1}\right) \quad ,
\end{aligned}$$

falls p ungerade ($p=2k+1$) oder p gerade ($p=2k+2$) und $u_{s-k-1}=0$. □

Bemerkungen. (1) Die rekursiv definierten Polynome $\Delta_n^*(\lambda)$ und $\phi_n^*(\lambda)$ können als charakteristische Polynome der Tridiagonalmatrizen ($\xi_i = (2\sqrt{4i^2-1})^{-1}$)

$$\begin{pmatrix} 0 & -\xi_2 & & \\ \xi_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & 0 & -\xi_{n-1} \\ & & \xi_{n-1} & 0 \end{pmatrix}_{n-1} \quad \text{bzw.} \quad \begin{pmatrix} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & 0 & -\xi_{n-1} \\ & & \xi_{n-1} & 0 \end{pmatrix}_{n} \qquad (3.21)$$

dargestellt werden.

(2) Explizit lassen sie sich bestimmen zu

$$\Delta_n^*(\lambda) = 2\binom{2n}{n} \sum_{\substack{\mu=(n-n_1),\\ (n-n_1)+2,\ldots}}^{n-1} \binom{n+\mu}{\mu} \frac{1}{(n-\mu)!}\lambda^\mu \quad , \; n_1 := \begin{cases} n, \text{ f. } n \text{ ungerade}, \\ n-1, \text{ f. } n \text{ gerade} ; \end{cases} \tag{3.22}'$$

$$\phi_n^*(\lambda) = \binom{2n}{n} \sum_{\substack{\mu=(n-n_2),\\ (n-n_2)+2,\ldots}}^{n} \binom{n+\mu}{\mu} \frac{1}{(n-\mu)!}\lambda^\mu \quad , \; n_2 := \begin{cases} n-1, \text{f. } n \text{ ungerade}, \\ n, \text{ f. } n \text{ gerade}. \end{cases} \tag{3.22}''$$

Für n=0(1)7 sind die Polynome Δ_n^* und ϕ_n^* im Anhang A3 aufgelistet.

(3) Aufgrund der Identität ($n \geq 0$)

$$\Delta_n^*(\lambda)\,\phi_{n+1}^*(\lambda) - \Delta_{n+1}^*(\lambda)\,\phi_n^*(\lambda) = (-1)^{n+1} K_n \tag{3.23}$$

mit K_n aus (3.19) erhält man die Teilerfremdheit der Polynome Δ_n^* und ϕ_n^* für alle $n \geq 0$.

Durch $\theta(\lambda) = \Phi_{i=0}^{[\frac{p-3}{2}]} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda)$ mit χ_k aus (3.12) sind alle Approximationen an $t(\lambda) = 2\tanh(1/2\lambda)$ der Ordnung p mittels der (2s-p)-parametrigen Residuenfunktion χ_k charakterisiert. Durch Rückführung der eingeführten Transformationen (cf. Lemma 3.1) ergeben sich daraus alle rationalen Approximationen aus $\mathcal{R}_{s,s}$ an die Exponentialfunktion der vorgegebenen Ordnung p.

Korollar 3.6

Sei $0 \leq k \leq s-1$, $t(\lambda) = 2\tanh(1/2\lambda)$ $(\lambda \in \mathbb{C}-\{0\})$

und $\theta(\lambda) = \Phi_{i=0}^{k} \xi_i^2/\lambda + u(\lambda)/v(\lambda)$.

θ ist genau dann eine rationale Approximation an t aus $\mathcal{R}_{s-1,s}$ der Ordnung $p \geq 2k+1$, wenn

$$\frac{u(\lambda)}{v(\lambda)} = \frac{u_{s-k-1}\lambda^{s-k-1} + u_{s-k-2}\lambda^{s-k-2} + \ldots + u_o}{1\cdot\lambda^{s-k-1} + v_{s-k-2}\lambda^{s-k-2} + \ldots + v_o} \quad . \tag{3.24}$$

mit $u_i, v_i \in \mathbb{R}$ $(i=0,\ldots,s-k-1)$, $v_{s-k-1}=1$.

Die Approximationsordnung p ist genau dann gerade (p=2k+2), wenn $u_{s-k-1}=0$.

Beispiel. Alle rationalen Approximationen an $t(\lambda) = 2\tanh(1/2\lambda)$ aus $\mathcal{R}_{s-1,s}$ der Ordnung $p \geq 2s-5$ $(s \geq 3)$ sind darstellbar als Kettenbruch

$$\Phi_{i=o}^{s-4} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_{s-3}(\lambda) = \Phi_{i=o}^{s-3} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + R_{s-2}(\lambda)$$

mit $R_{s-2}(\lambda) = \frac{u(\lambda)}{v(\lambda)} = \frac{u_2\lambda^2 + u_1\lambda + u_o}{\lambda^2 + v_1\lambda + v_o}$ mit $u_2,u_1,u_o,v_1,v_o \in \mathbb{R}$.

Die Approximatonen der Ordnungen 2s-4(1)2s erhält man durch folgende Parametrisierung :

p	$R_{s-2}(\lambda)$ mit	Anzahl der Parameter
2s-5	$u_2,u_1,u_o,v_1,v_o \in \mathbb{R}$	5
2s-4	$u_2=0$; $u_1,u_o,v_1,v_o \in \mathbb{R}$	4
2s-3	$u_2=0$, $u_1=\xi_{s-2}^2$; $u_o,v_1,v_o \in \mathbb{R}$	3
2s-2	$u_2=0$, $u_1=\xi_{s-2}^2$, $u_o=\xi_{s-2}^2 v_1$; $v_1,v_o \in \mathbb{R}$	2
2s-1	$u_2=0$, $u_1=\xi_{s-2}^2$, $u_o=\xi_{s-2}^2 v_1$, $v_o=\xi_{s-1}^2$; $v_1 \in \mathbb{R}$	1
2s	$u_2=u_o=v_1=0$, $u_1=\xi_{s-2}^2$, $v_o=\xi_{s-1}^2$	0

Residuenfunktion und Normalform

Der Residuenfunktion χ_k aus (3.12) kommt aufgrund von Satz 3.4 und Korollar 3.6 eine fundamentale Bedeutung bzgl. der Konstruktion von rationalen Approximationen an 2 tanh(1/2λ) zu. Ist θ insbesondere die modifizierte Stabilitätsfunktion eines RKV ß der Ordnung p, so kann χ_k als Quotient zweier charakteristischer Polynome ausgedrückt werden, deren erzeugende Matrizen als Untermatrizen einer speziellen Matrix $\tilde{Y}$ auftreten.

Satz 3.7

Sei $\theta(\lambda)=g(\lambda)/f(\lambda)$ eine (rationale) Approximation an $t(\lambda)=2\tanh(\frac{1}{2\lambda})$ der Ordnung p mit $\text{grad}(g)\leq s-1$, $\text{grad}(f)\leq s$ und $k=[(p-1)/2]$ sowie $\xi_i=(4(4i^2-1))^{-1/2}$ $(i=1,\ldots,k)$.

a) Dann existieren Matrizen $\tilde{Y} \in \mathbb{R}^{s\times s}$ ($\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{(s-k)\times(s-k)}$ bel.) mit

$$\tilde{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -\xi_1 & & & \\ \xi_1 & 0 & \ddots & & \\ & \ddots & 0 & -\xi_k & \\ & & \xi_k & & \\ & & & & \tilde{Q} \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ k \\ \\ \end{matrix}, \qquad (3.25)$$

$$\begin{matrix} & & k & & \end{matrix}$$

so daß $\theta(\lambda) = \prod_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda) = \left[(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}\right]_{11}$ und (3.26)

$$\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \cdot \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \xi_k^2 \cdot \frac{|\hat{\tilde{Q}} + \lambda \hat{I}|}{|\tilde{Q} + \lambda I|} \quad . \tag{3.27}$$

b) Hat $\tilde{Q}$ aus a) die Partitionierung

$$\tilde{Q} = \left(\begin{array}{c|c} \tilde{q}_{11} & g^T \\ \hline h & \hat{\tilde{Q}} \end{array}\right) \tag{3.28}$$

mit $\tilde{q}_{11} \in \mathbb{R}$, $g,h \in \mathbb{R}^{s-k-1}$, $\hat{\tilde{Q}} \in \mathbb{R}^{(s-k-1)\times(s-k-1)}$, so ist

$$\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \cdot \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \frac{\xi_k^2}{\lambda} + (\tilde{q}_{11} - g^T(\hat{\tilde{Q}} + \lambda \hat{I})^{-1} h) \quad . \tag{3.29}$$

c) Die Ordnung p ist genau dann gerade (p=2k+2), wenn in a) und b) zusätzlich $\tilde{q}_{11}=0$ erfüllt ist.

Beweis. Durch Entwickeln der Determinanten $|\tilde{Y} + \lambda I|$ und $|\hat{\tilde{Y}} + \lambda \hat{I}|$, beginnend an der linken oberen Ecke von $\tilde{Y}$, ergibt sich für $\theta(\lambda) = \left[(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = |\hat{\tilde{Y}} + \lambda \hat{I}| / |\tilde{Y} + \lambda I|$ eine Kettenbruchentwicklung der Form $\prod_{i=0}^{k-1} \xi_i^2/\lambda + \text{Rest}(\lambda)$. Ein Vergleich der Entwicklungsreste ergibt die Darstellung (3.27) für χ_k. Die weitere Darstellung (3.29) erhält man aufgrund der Partitionierung (3.28) durch Anwendung einer bekannten Formel für Inverse geränderter Matrizen (cf. Frazer et al.[1965], S.113). Nach Korollar 3.5 ist für gerades p (p=2k+2) notwendig und hinreichend, daß

$$\chi_k(\lambda) = \frac{\xi_k^2}{\lambda} + \frac{u(\lambda)}{v(\lambda)} \quad \text{mit} \quad u,v \in \Pi_{s-k-1} \text{ und } u_{s-k-1}=0 \ .$$

Die letzte Bedingung ist äquivalent mit $\tilde{q}_{11}=0$. □

Damit kann die modifizierte Stabilitätsfunktion θ eines RKV ß der vorgegebenen Ordnung p formal durch eine Matrix $\tilde{Y}$ dargestellt werden, die eine Partitionierung entsprechend der Normalform Y aus § 2 besitzt (cf. auch (3.7)). Man beachte aber, daß die Matrizen Y aus (3.7) und $\tilde{Y}$ aus (3.25) i.A. nicht identisch sein müssen, wie das folgende Beispiel zeigt.

Beispiel. Betrachte das 3-stufige RKV der Ordnung 3 mit $0 \neq a,b \in \mathbb{R}$.

$$ß = [c,A,b] := \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 2\sqrt{2}(a-\sqrt{3}b)+1 & 4\sqrt{2}(\sqrt{3}b-a) & 2\sqrt{2}(a-\sqrt{3}b)-1 \\ 2(1+\sqrt{2}a) & 4(1-\sqrt{2}a) & 2\sqrt{2}a \\ 3+2\sqrt{2}(a+\sqrt{3}b) & 8-4\sqrt{2}(a+\sqrt{3}b) & 2\sqrt{2}(a+\sqrt{3}b)+1 \end{pmatrix}, \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}\right].$$

Die Normalform $Y=W^T BCW$ (C aus (1.6)) aus § 2 (bzw. (3.7) mit $W^T BW=I$) ergibt sich zu

$$Y = \left(\begin{array}{c|cc} 0 & -\xi_1 & a \\ \hline \xi_1 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right) \qquad (\xi_1 := \frac{1}{2\sqrt{3}}) \ ,$$

während $\tilde{Y}$ aus (3.25) als

$$\tilde{Y} = \left(\begin{array}{c|cc} 0 & -\xi_1 & 0 \\ \hline \xi_1 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$$

gewählt werden kann. In beiden Fällen ist mit $\xi_1=1/(2\sqrt{3})$

$$\left[(Y + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \left[(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \lambda \cdot \left[\lambda^2+\xi_1^2\right]^{-1} = \frac{1}{\lambda} + \frac{\xi_1^2}{\lambda} \ .$$

Die Bedeutung der Residuenfunktion χ_k bzgl. der Charakterisierung A-stabiler RKV oder äquivalent dazu, bzgl. der Charakterisierung A-verträglicher Approximationen an $\exp(z)$, kommt nun im folgenden Satz zum Ausdruck.

Satz 3.8

Sei $\theta(\lambda) = \Phi_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda)$ ($k=[(p-1)/2]$) die modifizierte Stabilitätsfunktion eines s-stufigen RKV ß der Ordnung p. Dann ist ß genau dann A-stabil, wenn $\chi_k \in \mathbb{P}$.

Somit lassen sich nicht nur alle Approximationen Θ an 2 tanh aus $\mathcal{R}_{s-1,s}$ einer vorgegebenen Ordnung über die Residuenfunktion charakterisieren (cf. Korollar 3.6), auch die reelle Positivität von Θ wird durch dieselbe Bedingung an χ_k garantiert.

Beweis. Für $k=[(p-1)/2]$ sei Θ gegeben durch $\theta(\lambda) = \Phi_{i=0}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda)$. Aufgrund von Satz 3.2 ist die Äquivalenz von $\Theta \in \mathbb{P}$ und $\chi_k \in \mathbb{P}$ zu zeigen. Setze für $i=1,2,\ldots$

$$g_i^* := g_i(\lambda, f(\lambda)) := \frac{1}{\lambda + \xi_i^2 f(\lambda)} \ , \qquad (3.30)$$

wobei wie üblich $\xi_i^2 = (4(4i^2-1))^{-1}$ ($i=1,2,..$) und $\xi_o^2 = 1$.

Damit ist

$$\theta(\lambda) = \overset{k-1}{\underset{i=o}{\Phi}} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda)$$

$$= g_1(\lambda, g_2(\lambda, \ldots\ldots, g_{k-1}(\lambda, \frac{1}{\xi_k^2}\chi_k(\lambda)) \ldots)) , \qquad (3.31)$$

mit $\chi_k \in \mathcal{Q}_{s-k,s-k}$. Ferner sind alle Zwischen-Approximierenden des Kettenbruches (3.31) rationale Funktionen des Typs $(\lambda^n + \ldots) / (\lambda^{n+1} + \ldots)$ und somit im Punkt $\{\infty\}$ regulär. Damit ist $g_i \in \mathbb{P}$ $(i=1,\ldots,k-1)$ genau dann, wenn $f \in \mathbb{P}$ (cf. Lemma 1.6 (iii)), also $\chi_k \in \mathbb{P}$ genau dann, wenn $\theta \in \mathbb{P}$. □

Nach Satz 3.7 existiert eine Matrix $\tilde{Y}$ der Gestalt (3.25), so daß einerseits die modifizierte Stabilitätsfunktion θ durch $\theta(\lambda) = [(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}]_{11}$ und andererseits die Residuenfunktion χ_k durch $\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 [(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}]_{11}$ mit $\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{(s-k)\times(s-k)}$ dargestellt werden können. Nach der Bemerkung im Anschluß an Korollar 3.5 läßt sich χ_k bzgl. der Kettenbruchentwicklung von θ um eine Stufe weiter entwickeln. Auch die Matrixdarstellung (3.27) von χ_k gestattet eine Weiterentwicklung (cf. (3.29)), so daß wir folgendes Resultat gewinnen.

Korollar 3.9

Mit der Partitionierung von $\tilde{Q}$ aus (3.28) sind folgende Aussagen äquivalent

$$\begin{aligned} &\text{(i)} \quad \chi_k \in \mathbb{P} \text{ mit } \chi_k(\lambda) = \xi_k^2 [(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}]_{11} = \xi_k^2 \frac{|\hat{\tilde{Q}} + \lambda \hat{I}|}{|\tilde{Q} + \lambda I|} , \\ &\text{(ii)} \quad R_{k+1}^{\tilde{q}_{11}} \in \mathbb{P} \text{ mit } R_{k+1}^{\tilde{q}_{11}}(\lambda) = \tilde{q}_{11} - g^T(\hat{\tilde{Q}} + \lambda \hat{I})^{-1} h . \end{aligned} \qquad (3.32)$$

Die Ordnung p ist genau dann gerade, wenn $\tilde{q}_{11}=0$.

Ist umgekehrt eine $(s-k)\times(s-k)$-Matrix $\tilde{Q}$ gegeben, so läßt sich nach Lemma 2.5 mittels der Matrix $\tilde{Y}$ aus (3.25) ein A-stabiles RKV der Ordnung $p=\{^{2k+1}_{2k+2}$ konstruieren, falls gilt $R_{k+1}^{\tilde{q}_{11}} \in \mathbb{P}$ bzw. $R_{k+1}^{o} \in \mathbb{P}$. χ_k bzw. $R_{k+1}^{\tilde{q}_{11}}$ sind rationale Funktionen g/f mit maximalem Zähler-/Nenner-Grad (s-k) bzw. (s-k-1). Im weiteren sollen nun (praktische) Kriterien für $g/f \in \mathbb{P}$ hergeleitet werden. Daraus lassen sich Bedingungen an die Koeffizienten der Polynome f und g ableiten.

A-Verträglichkeit

Satz 3.8 erlaubt eine Charakterisierung der A-Verträglichkeit der Stabilitätsfunktion W eines RKV ß durch die Forderung $\chi_k \in \mathbb{P}$ der zugehörigen Residuenfunktion χ_k, wobei $k=k(p)=[(p-1)/2]$. χ_k ist eine rationale Funktion der Form g/f mit $g/f \in \mathcal{Q}_{s-k,s-k}$ und falls p gerade, mit $g/f \in \mathcal{Q}_{s-k-1,s-k}$. Für die Konstruktion von A-stabilen RKV bzw. A-verträglichen Approximationen an exp(z) (cf. Korollar 3.6) einerseits und andererseits für einen formalen Vergleich von A- und algebraisch stabilen Verfahren (cf. §4) sind notwendige und hinreichende Bedingungen an die Polynome g und f (bzw. deren Koeffizienten) interessant, so daß $g/f \in \mathbb{P}$ ist.
Dazu wird im weiteren die reelle Positivität von rationalen Funktionen auf der imaginären Achse (I-Verträglichkeit) untersucht und Kriterien dafür angegeben. Durch einfache Zusatzbedingungen, die einem Regularitäts-Prinzip entsprechen, ist es danach möglich, die reelle Positivität für rationale Funktionen g/f in der ganzen rechten komplexen Halbebene zu verifizieren.

Als Grundlage dient hierbei Lemma 1.6 (iv) (cf. Dahlquist[1978]), das in einer etwas modifizierten Form lautet :

Eine rationale Funktion g/f mit reellen Koeffizienten und ohne gemeinsamen Teiler ist genau dann aus $\mathbb{P}$, wenn

(i) $(f+g)$ hat nur Nullstellen in $\mathbb{C}_-$ und (3.33)

(ii) $\tilde{E}(y) := \mathrm{Re}\{ g(iy) \cdot f(-iy) \} \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$. (3.34)

Wir nennen eine rationale Funktion g/f I-verträglich, wenn (3.34) erfüllt ist. Diese Forderung ist äquivalent zu $\mathrm{Re}\{(g/f)(iy)\} \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$.

Für die modifizierte Stabilitätsfunktion $\theta =: g/f$ hängt $\tilde{E}$ eng mit dem von Nørsett[1975] eingeführten E-Polynom bzgl. $W(z) = N(z)/D(z)$

$$E(y) = |D(iy)|^2 - |N(iy)|^2 \qquad (y \in \mathbb{R}) \tag{3.35}$$

zusammen. Es gilt nämlich

Lemma 3.10

Seien $W(z) = N(z)/D(z)$ bzw. $\theta(\lambda) = g(\lambda)/f(\lambda)$ die zu einem RKV gehörenden Stabilitätsfunktionen (3.1) bzw. (3.3). Dann gilt für alle $y \in \mathbb{R}-\{0\}$ die Beziehung

$$\begin{aligned} E(y) &= 8\, y^{2s}\, \tilde{E}(1/y) \quad , \\ \tilde{E}(y) &= \frac{1}{8}\, y^{2s}\, E(1/y) \quad . \end{aligned} \tag{3.36}$$

Damit ist genau dann $E(y) \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$ (I-Verträglichkeit von W, cf. Nørsett[1975]), wenn $\tilde{E}(y) \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$ (I-Verträglichkeit von θ).

Beweis. Für $W(z) = N(z)/D(z)$ folgen aufgrund von

$$\theta(\lambda) = \frac{g(\lambda)}{f(\lambda)} = 2\,\frac{[D(-1/\lambda) - N(-1/\lambda)]\,(-\lambda)^s}{[D(-1/\lambda) + N(-1/\lambda)]\,(-\lambda)^s}$$

die Beziehungen

$$\begin{aligned} g(\lambda) &= 2\,[D(-1/\lambda) - N(-1/\lambda)](-\lambda)^s \\ f(\lambda) &= [D(-1/\lambda) + N(-1/\lambda)]\,(-\lambda)^s \quad \text{bzw.} \\ N(z) &= (-z)^s[2\, f(-1/z) - g(-1/z)] \\ D(z) &= (-z)^s[2\, f(-1/z) + g(-1/z)] \quad . \end{aligned}$$

Setzt man $z = x + iy$, so gilt für alle $y \in \mathbb{R}-\{0\}$

$$\begin{aligned} E(y) &= |D(iy)|^2 - |N(iy)|^2 = \mathrm{Re}\,\{[D - N](iy)\overline{[D + N](iy)}\} \\ &= \mathrm{Re}\,\{(-iy)^s\, 2\, g(-1/iy)\, 4\, \overline{(-iy)^s}\, \overline{f(-1/iy)}\} \\ &= 8\, y^{2s}\, \mathrm{Re}\,\{g(i/y)f(-i/y)\} = 8\, y^{2s}\, \tilde{E}(1/y) \quad . \end{aligned}$$

□

Für die hier betrachteten rationalen Funktionen der Form (cf. Satz 3.7)

$$\begin{aligned} \theta(\lambda) &= \frac{g(\lambda)}{f(\lambda)} = \left[(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} \quad \text{und} \\ \chi_k(\lambda) &= \xi_k^2\, \frac{g^*(\lambda)}{f^*(\lambda)} = \xi_k^2\, \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} \end{aligned} \tag{3.37}$$

kann das $\tilde{E}$-Polynom explizit angegeben werden.

Lemma 3.11

Für die rationalen Funktionen θ und χ_k aus (3.37) ergibt sich das $\tilde{E}$-Polynom aus (3.34) zu $(y\in\mathbb{R})$

$$\begin{aligned}\tilde{E}_\theta(y) &= [\tilde{Y}\ \mathrm{Adj}(\tilde{Y}^2 + y^2 I)]_{11} \quad \text{bzw.}\\ \tilde{E}_{\chi_k}(y) &= \xi_k^2\,[\tilde{Q}\ \mathrm{Adj}(\tilde{Q}^2 + y^2 I)]_{11}\ .\end{aligned} \tag{3.38}$$

Bemerkung.
Ist die Matrix $\tilde{Y}$ bzw. $\tilde{Q}$ regulär, so existieren für $\tilde{E}_\theta$ und $\tilde{E}_{\chi_k}$ die Darstellungen $(y\in\mathbb{R})$

$$\begin{aligned}\tilde{E}_\theta(y) &= |\tilde{Y}|\,|\tilde{Y} + y^2\tilde{Y}^{-1}|^* \quad \text{bzw.}\\ \tilde{E}_{\chi_k}(y) &= \xi_k^2\,|\tilde{Q}|\,|\tilde{Q} + y^2\tilde{Q}^{-1}|^*\ ,\end{aligned} \tag{3.39}$$

wobei $|D|^*$ die erste Hauptunterdeterminante von D bezeichnet ($|D|^* = [\mathrm{Adj}(D)]_{11}$).

Beweis. Sei $g(\lambda)/f(\lambda) = [(\tilde{Y} + \lambda I)^{-1}]_{11} = |\tilde{Y} + \lambda I|^*/|\tilde{Y} + \lambda I|$. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned}\tilde{E}_\theta(y) &= \mathrm{Re}\,\{g(iy)\,f(-iy)\} = |f(iy)|^2\,\mathrm{Re}\,\{g(iy)/f(iy)\}\\ &= \big||\tilde{Y} + iyI|\big|^2\,\mathrm{Re}\{[(\tilde{Y} + iyI)^{-1}]_{11}\}\\ &= |\tilde{Y} + iyI|\,|\tilde{Y} - iyI|\ \ \mathrm{Re}\{\ [(\tilde{Y} - iyI)(\tilde{Y}^2 + y^2 I)^{-1}]_{11}\}\\ &= |\tilde{Y}^2 + y^2 I|\ [\tilde{Y}(\tilde{Y}^2 + y^2 I)^{-1}]_{11} = [\tilde{Y}\ \mathrm{Adj}(\tilde{Y}^2 + y^2 I)]_{11}.\end{aligned}$$

Analog zeigt man die Aussage für $\xi_k^2\, g^*(\lambda)/f^*(\lambda) = \xi_k^2\,[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}]_{11}$.
Ist zusätzlich $\tilde{Y}$ regulär, so existiert $\tilde{Y}^{-1}$ und man erhält weiter

$$\tilde{E}_\theta(y) = |\tilde{Y}|\,|\tilde{Y} + y^2\tilde{Y}^{-1}|\ [(\tilde{Y} + y^2\tilde{Y}^{-1})^{-1}]_{11} = |\tilde{Y}|\,|\tilde{Y} + y^2\tilde{Y}^{-1}|^*\ .$$ □

Aus (3.38) oder (3.39) lassen sich nun Bedingungen an die Koeffizienten von g und f herleiten, so daß θ bzw. χ_k I-verträglich werden.

Beispiel.

Für $\tilde{Q} := \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ und $|\tilde{Q}| = ad - bc \neq 0$ ergibt sich nach (3.39)

$$\tilde{E}_{\chi_k}(y) = \xi_{s-2}^2\,(\ a\,y^2 + d(ad - bc)\ )\ .$$

$\tilde{E}_{\chi_k}(y) \geq 0$ für alle $y\in\mathbb{R}$ genau dann, wenn $a,d \geq 0$ und $ad - bc > 0$.

Betrachten wir wieder die zu einem RKV $\mathcal{B} = [c,A,b]$ der Ordnung p nach Satz 3.7 existierenden Darstellungen der modifizierten Stabilitätsfunktion θ und der Residuenfunktion χ_k aus (3.37), so kann eine zu Satz 3.8 analoge Äquivalenz der I-Verträglichkeit von θ und χ_k gezeigt werden.

Satz 3.12

Sei $\mathcal{B}$ ein RKV der Ordnung p mit der modifizierten Stabilitäts-Funktion θ und der Residuenfunktion χ_k. Dann ist für alle $y \in \mathbb{R}$ $\tilde{E}_\theta(y) \geq 0$ genau dann, wenn $\tilde{E}_{\chi_k}(y) \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$.

Damit genügt es, für die I-Verträglichkeit von $\theta = \Phi_{i=0}^{k-1} + \chi_k$ nur Bedingungen für die I-Verträglichkeit von χ_k anzugeben.
Der Beweis stützt sich im wesentlichen auf die Gültigkeit der Beziehung ($y \in \mathbb{R}$)

$$\tilde{E}_\theta(y) = K_k \tilde{E}_{\chi_k}(y) \quad \text{mit} \quad K_n := \frac{(n!)^2}{(2n)!(2n+1)!} \tag{3.40}$$

und ist technischer Natur. Wir verweisen deshalb bzgl. eines Beweises auf den Anhang A4. □
Zusammenfassend erhalten wir nun folgendes Resultat.

Korollar 3.13

Ein RKV der Ordnung p mit der modifizierten Stabilitätsfunktion $\theta = \Phi_{k-1} + \chi_k$ mit irreduzibler Darstellung $\chi_k = \xi_k^2 \, g^*/f^*$ ist genau dann A-stabil, wenn

$$\begin{aligned} &\text{(i)} \quad \tilde{E}_{\chi_k}(y) \geq 0 \text{ für alle } y \in \mathbb{R} \text{ und} \\ &\text{(ii)} \quad g^* + f^* \text{ hat nur NST in } \mathbb{C}_- \,. \end{aligned} \tag{3.41}$$

Die Bedingung (3.41) an das Polynom g^*+f^* mit dem Maximalgrad s-k kann mittels des Roth-Kriteriums (cf. Müller[1977],S.133) nachgeprüft werden. Eine Charakterisierung der Bedingung (ii) durch Angabe getrennter Bedingungen an die Polynome g^* und f^* ist in konstruktiver Hinsicht von großem Interesse. Indem wir ein Ergebnis von E. Hairer (Hairer[1982],Theoreme 5 und 6)

auf unsere Residuenfunktion χ_k übertragen, erhalten wir schließlich folgendes Resultat.

Satz 3.14

Ein RKV der Ordnung p mit der modifizierten Stabilitätsfunktion $\Theta = \Phi_{k-1} + \chi_k$ mit irreduzibler Residuenfunktion $\chi_k = \xi_k^2\, g^*/f^*$ ist genau dann A-stabil, wenn

$$\text{(i)}\quad \tilde{E}_{\chi_k}(y) \geq 0 \quad \text{für alle } y\in\mathbb{R}\ ;$$

$$\text{(ii)}\quad g^* \text{ und } f^* \text{ haben nur Nullstellen in } \bar{\mathbb{C}}_-\ ; \tag{3.42}$$

$$\text{(iii)}\quad \operatorname{Res}(\chi_k, i\gamma) > 0 \quad \text{für alle } \gamma\in\Gamma := \{\gamma\in\mathbb{R} \mid f^*(i\gamma)=0\} \text{ und}$$
$$\operatorname{Res}(\chi_k^{-1}, i\sigma) > 0 \quad \text{für alle } \sigma\in\Sigma := \{\sigma\in\mathbb{R} \mid g^*(i\sigma)=0\}\ . \tag{3.43}$$

Sind die Nullstellen bzw. Pole von $\chi_k = \xi_k^2\, g^*/f^*$ auf der imaginären Achse einfach, so gilt $(\gamma,\sigma\in\mathbb{R})$

$$\operatorname{Res}(\chi_k, i\gamma) = \xi_k^2 \frac{g^*(i\gamma)}{f^{*\prime}(i\gamma)} \qquad \text{und}$$
$$\operatorname{Res}(\chi_k^{-1}, i\sigma) = \xi_k^{-2} \frac{f^*(i\sigma)}{g^{*\prime}(i\sigma)}\ . \tag{3.44}$$

Man beachte ferner, daß für die hier betrachtete Residuenfunktion χ_k die beiden Theoreme 5 und 6 aus Hairer[1982] eine identische Aussage liefern.

Satz 3.14, angewandt auf die spezielle Darstellung

$$\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \cdot \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \xi_k^2 \frac{|\tilde{Q} + \lambda I|^*}{|\tilde{Q} + \lambda I|} = \xi_k^2 \frac{g^*(\lambda)}{f^*(\lambda)} \tag{3.45}$$

mit $\tilde{Q}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ $(n\in\mathbb{N})$, liefert

Korollar 3.15

Sei $\chi_k(\lambda) = \xi_k^2 \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11}$ irreduzibel und $\tilde{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ $(n \in \mathbb{N})$.

χ_k ist genau dann in $\mathbb{P}$, wenn

(i) $\left[\tilde{Q}\ \mathrm{Adj}(\tilde{Q}^2 + y^2 I)\right]_{11} \geq 0$ für alle $y \in \mathbb{R}$; (3.46)

(ii) $\tilde{Q}$ und $\hat{\tilde{Q}}$ haben nur Eigenwerte in $\bar{\mathbb{C}}_+$;

(iii) Rein imaginäre Eigenwerte von $\tilde{Q}$ und $\hat{\tilde{Q}}$ $(0 \in i\mathbb{R})$ sind einfach und haben positive Residuen bzgl. χ_k und χ_k^{-1}.

Ist $\tilde{Q}$ regulär, so kann (3.46) zu (3.39) vereinfacht werden.

Beispiel.

Alle Approximationen an $t(\lambda) = 2\tanh(1/2\lambda)$ der Ordnung $p \geq 2s-3$ können durch

$$\theta(\lambda) = \Phi_{i=0}^{s-3} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_{s-2}(\lambda) \quad \text{mit}$$

$$\chi_{s-2}(\lambda) = \xi_{s-2}^2 \cdot \frac{g^*(\lambda)}{f^*(\lambda)} = \xi_{s-2}^2 \cdot \frac{\lambda + \alpha}{\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma}$$

$(\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R})$ charakterisiert werden.

(a) Wegen

$$\chi_{s-2}(\lambda) = \xi_{s-2}^2 \cdot \frac{\lambda + \alpha}{\lambda^2 + \beta\lambda + \gamma} = \left| \frac{\xi_{s-2}^2}{\lambda} \right| + \frac{(\beta-\alpha)\lambda + \gamma}{\lambda + \alpha}$$

sind die Bedingungen von Satz 3.14 genau dann erfüllt, wenn

$$\beta - \alpha \geq 0\ ,\ \alpha \geq 0 \quad \text{und} \quad \gamma \geq 0$$

oder $\beta \geq \alpha \geq 0$ und $\gamma \geq 0$. (3.47)

(b) Für

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad \text{erhält man}$$

$$\chi_{s-2}(\lambda) = \xi_{s-2}^2 \left[(\tilde{Q} + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \xi_{s-2}^2 \cdot \frac{\lambda + d}{\lambda^2 + (a+d)\lambda + (ad-bc)}$$

$$= \frac{\xi_{s-2}^2}{\lambda} + \frac{a\lambda + (ad-bc)}{\lambda + d} \quad .$$

Die Bedingung (3.46) aus Korollar 3.15 lautet hier

$$\left[\tilde{Q}\ \mathrm{Adj}(\tilde{Q}^2 + y^2 I)\right]_{11} = \left[\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} bc+d^2+y^2 & -b(a+d) \\ -c(a+d) & a^2+bc+y^2 \end{pmatrix}\right]_{11}$$
$$= a\,y^2 + d(ad - bc) \quad .$$

Die Bedingung (ii) fordert $d \geq 0$ und $\det(\tilde{Q}) = ad - bc \geq 0$, sodaß Korollar 3.15 in diesem Fall genau dann erfüllt ist, wenn

$$a\ ,\ d \geq 0 \quad \text{und} \quad ad - bc \geq 0 \quad . \tag{3.48}$$

Man erkennt leicht die Äquivalenz der beiden Bedingungen (3.47) und (3.48). Wie schon im Beispiel auf S. -32- gezeigt wurde, ergeben sich die Approximationen an t der Ordnungen p=2s-2, 2s-1 und 2s als Spezialfälle.

p	zusätzliche Bedingungen an $\tilde{Q} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$
2s-3	-
2s-2	$a = 0 \qquad sp(\tilde{Q}) = sp(\hat{\tilde{Q}})$
2s-1	$ad - bc = \xi_{s-1}^2 \qquad \det(\tilde{Q}) = \xi_{s-1}^2$
2s	$d = 0 \qquad sp(\hat{\tilde{Q}}) = sp(\hat{\hat{\tilde{Q}}}) = 0$

In diesem Paragraphen wurden Approximationen an exp(z) der Ordnung $p \geq 1$ mittels einer rationalen Residuenfunktion χ_k charakterisiert. Die dazu verwendete Technik der Kettenbruchentwicklung wurde schon von Butcher [1977] für den speziellen Fall $p \geq 2s-2$ benützt. Ferner konnte gezeigt werden, daß A-Verträglichkeit von W aus (3.1) mit reeller Positivität der Residuenfunktion χ_k äquivalent ist. Hairer [1982] erzielte ein analoges Ergebnis, welches hier in die Theorie der Kettenbrüche eingefügt werden konnte. Für ein gegebenes RKV ß war es weiter möglich, die Residuenfunktion durch eine Matrix $\tilde{Q}$ (Residuenmatrix) darzustellen, die eine Untermatrix einer der Normalform Y aus § 2 analog partitionierten Matrix ist. Auch hier hängt die Dimension von $\tilde{Q}$ nur von der Ordnung des Verfahrens, nicht aber von der Stufenzahl ab.

§ 4 Unterschiede von linearer und nichtlinearer Stabilität.

In den beiden vorangegangenen Paragraphen wurde jeweils der nichtlineare- und lineare Stabilitätsbegriff für RKV in konstruktiver Weise untersucht. Dabei konnte für algebraisch stabile Verfahren eine Grundform S bestimmt werden, die im wesentlichen durch die Ordnung des Verfahrens festgelegt ist. Die Residuenmatrix Q als Untermatrix von S steht dabei als Parameterträger zur Verfügung. Eine analoge Struktur wie S weist die bzgl. der (Kongruenz-) Transformations-Matrix W (cf. (3.8)') gebildete Normalform Y auf (cf. § 2 und (3.7)).

Im Gegensatz dazu konnten, aufgrund der speziellen Definition der A-Stabilität, keine direkten, zu oben analogen Aussagen für die Grundform S bzw. die Normalform Y gemacht werden. Allerdings wurde gezeigt (cf. Satz 3.7), daß die modifizierte Stabilitätsfunktion θ durch eine Matrix $\tilde{Y}$ erzeugt werden kann, die eine ähnliche Struktur wie Y besitzt. Wie ein Beispiel in § 3 zeigt, ist im Allgemeinen nicht $\tilde{Y} = Y$ zu erwarten. Für RKV ß mit positiven Gewichten lassen sich jedoch gewisse Beziehungen zwischen $\tilde{Y}$ und Y zeigen, wodurch ein formal direkter Vergleich der beiden betrachteten (linearen- und nichtlinearen) Stabilitätsbegriffe möglich ist (Satz 4.2). An einigen Beispielen wird der Unterschied demonstriert.

Die Matrix $\tilde{Y}$ kann ferner dazu benützt werden, eine formale Reduktion einer von Hairer [1982] geäußerten Vermutung zu erzielen (Lemma 4.10), welche besagt, daß es zu jedem A-stabilen RKV mit positiven Gewichten ein algebraisch stabiles RKV mit invarianter Ordnung und Stabilitätsfunktion gibt. Mit Hilfe eines kontrolltheoetischen Ergebnisses (Satz 4.11, Anderson[1967]) wird diese Vermutung bewiesen.

Hauptresultat.

Unabhängig von den bisherigen Ergebnissen läßt sich für RKV, die zwar A- nicht aber algebraisch stabil sind, eine erste notwendige Bedingung bzgl. der Definitheit der Stabilitäts-Matrix M aus (1.19) angeben.

Satz 4.1

Das RKV ß erfülle die Bedingungen $b_i>0$ $(i=1,\dots,s)$, $c_i\neq c_j$ $(i\neq j)$ und $W_ß(z) \neq W_ß(-z)^{-1}$. Ist die Stabilitäts-Matrix M von ß definit, so ist ß genau dann A-stabil, wenn es algebraisch stabil ist.

Beweis. Das RKV erfülle die Voraussetzungen mit definiter Stabilitätsmatrix $M = BC + C^TB$ aus (1.19). Für positiv semidefinites M ist die Behauptung trivialerweise erfüllt.
Ist $M \not\geq 0$, so ist ß nicht AS. Allerdings ist das zu ß gespiegelte RKV $ß^*$ (cf. (1.23)) AS, da $M^* = M(ß^*) = -PMP$ mit $P=\begin{pmatrix} & & 1\\ & \iddots & \\ 1 & & \end{pmatrix}$ (cf. Scherer-Türke[1983]). Damit ist also $ß^*$ auch A-stabil und wegen $W_ß(z) \neq W_ß(-z)^{-1} \equiv W_{ß^*}(z)$ ist ß nicht A-stabil, woraus die Behauptung folgt. □

Damit muß, falls ß zwar A-stabil, nicht aber algebraisch stabil ist, die Stabilitätsmatrix M aus (1.19) indefinit sein. Die Bedingung $W_ß(z) \neq W_ß(-z)^{-1}$ fordert, daß die Stabilitäts-Funktion W nicht invariant bzgl. Spiegelung (1.22) ist. Insbesondere führen diagonale Padé-Approximationen an $\exp(z)$ auf Stabilitäts-Funktionen W mit $W_ß(z)\equiv W_ß(-z)^{-1}$.
Für analytische Zwecke ist die soeben bewiesene Indefinitheit von M für RKV mit unterschiedlichem linearen- und nichtlinearen Stabilitätsverhalten noch zu ungenau. Faßt man jedoch die zentralen Ergebnisse aus den Paragraphen 2 und 3 (Satz 2.6, Lemma 3.3, Satz 3.7 und Satz 3.8) zusammen, so läßt sich das Hauptresultat dieses Paragraphen wie folgt formulieren (Satz 4.2).

Zu dem s-stufigen RKV $\beta = [c,A,b]$ der Ordnung p mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen betrachten wir die Normalform $Y = W^T BCW$ bzgl. der (Kongruenz-) Transformations-Matrix W (cf. § 2 oder Lemma 3.3). Y hängt mit der Grundform S aus (2.3) über ein obere Δ-Matrix R zusammen, die sich durch Cholesky-Zerlegung von $V^T BV$ ergibt. Mit

$$l := \min \left\{ \left[\frac{p-1}{2}\right] , \left[\frac{p'-1}{2}\right] \right\} \quad , \tag{4.1}$$

wobei p' die Ordnung des zu β transponierten RKV β^{τ} (cf. (1.23),Lemma 2.3(ii)) bezeichnet, hat die Normalform Y aufgrund von Satz 2.2 die Gestalt

$$Y = W^T BC\, W = \left[\begin{array}{cccc|c} 0 & -\xi_1 & & & \\ \xi_1 & 0 & -\xi_2 & & 0 \\ & \xi_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 0 & -\xi_l \\ \hline & & & \xi_l & \\ & 0 & & & Q \end{array}\right] \tag{4.2}$$

(Block-Grenzen nach Zeile bzw. Spalte l.)

mit $Q \in \mathbb{R}^{(s-l)\times(s-l)}$ und $\xi_j^2 = (4(4j^2-1))^{-1}$ $(j \geq 1)$.

Ferner bezeichne χ_l die Residuenfunktion der modifizierten Stabilitäts-Funktion θ, welche nach Lemma 3.3 und Satz 3.7 die Darstellung besitzt

$$\chi_l(\lambda) = \xi_l^2 \cdot [(Q + \lambda I)^{-1}]_{11} = \xi_l^2 \cdot \frac{|\hat{Q} + \lambda \hat{I}|}{|Q + \lambda I|} \quad . \tag{4.3}$$

<u>Satz 4.2</u>

Ein s-stufiges RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen ist

(i) A-stabil genau dann, wenn $\chi_l \in \mathbb{P}$,

(ii) algebraisch stabil genau dann, wenn $Q + Q^T \geq 0$.

Korollar 4.3 (Konstruktion)

Zu einer positiven QF [c,b] mit paarweise verschiedenen Stützstellen wird durch

$$A := W Y W^T B + \frac{1}{2} \mathbb{1} b^T \tag{4.4}$$

mit Y aus (4.2) ein RKV $\mathcal{B} = [c,A,b]$ der (Mindest-) Ordnung (2l+1) erzeugt, falls $p_{QF} \geq 2l+1$. Es ist genau dann A-stabil, wenn $\chi_1 \in \mathbb{P}$ und genau dann algebraisch stabil, wenn $Q + Q^T \geq 0$.
Die Ordnung p ist genau dann gerade (p=2l+2), wenn $p_{QF} \geq 2l+2$ und

$$q_{11} := [Q]_{11} = 0 . \tag{4.5}$$

Somit ist es nun möglich, durch formal einfach zu beschreibende Bedingungen an die Residuen-Matrix Q der Normalform Y aus (4.2), den (linearen-) A- sowie den (nichtlinearen) algebraischen Stabilitäts-Begriff zu charakterisieren. A-Stabilität ist äquivalent zu reeller Positivität einer rationalen Residuenfunktion der Form $\chi_1(\lambda) = \xi_1^2 \cdot [(Q + \lambda I)^{-1}]_{11}$ $(\lambda \in \mathbb{C})$, während algebraische Stabilität die positive Semidefinitheit von $Q+Q^T$ fordert. Inwiefern beide Bedingungen zusammenhängen, zeigt folgendes

Lemma 4.4

Gegeben sei eine rationale Funktion f_Q mit $f_Q(\lambda) := [(Q + \lambda I)^{-1}]_{11}$ und $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ $(n \in \mathbb{N})$. Dann ist $f_Q \in \mathbb{P}$, falls $Q + Q^T$ positiv semidefinit ist.

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} f_Q(\lambda) &= f_Q(\lambda) + \overline{f_Q(\lambda)} \\ &= e_1^T (Q + \lambda I)^{-1} e_1 + \overline{e_1^T (Q + \lambda I)^{-1} e_1} . \end{aligned}$$

Mit $q(\lambda) := (Q + \lambda I)^{-1} e_1$ ergibt sich

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} f_Q(\lambda) &= q^H (Q^T + \bar{\lambda} I) q + q^H (Q + \lambda I) q \\ &= q^H \{ (Q + Q^T) + 2 \operatorname{Re}(\lambda) I \} q . \end{aligned} \tag{4.6}$$

Ist nun $(Q+Q^T)$ positiv semidefinit, so ist $\operatorname{Re} f_Q(\lambda) > 0$ für alle $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$. □

Schon für einfachste Matrizen Q kann gezeigt werden, daß die Abbildung $q_+ : \mathbb{C}_+ \to \mathbb{C}^s : \lambda \to (Q + \lambda I)^{-1} e_1$ nicht surjektiv ist. Damit folgt aus obigem Beweis, insbesondere aufgrund der Identität (4.6), daß i.A. die positive Semidefinitheit von $(Q + Q^T)$ nicht notwendig für $f_Q \in \mathbb{P}$ ist. Wegen Satz 4.2 würde überdies eine Äquivalenz der beiden Bedingungen aus Lemma 4.4 für RKV mit positiven Gewichten eine Äquivalenz der A- und algebraischen Stabilität nach sich ziehen (cf. Wanner[1977], Scherer[1979]).

Hinsichtlich Korollar 3.15 liegt es nahe, die beiden Bedingungen aus Satz 4.2 bzgl. dem Eigenwertverhalten von Q zu untersuchen und zu vergleichen. Eine solche Untersuchung wird in § 5 (Strukturaussagen) für die geshiftete RK-Matrix C durchgeführt. Es ist leicht zu sehen, daß sich diese Aussagen völlig analog auf Q übertragen lassen, sodaß auf die Ergebnisse in § 5 verwiesen wird.

Wie in der Bemerkung im Anschluß an Satz 3.4 und Korollar 3.5 bereits gezeigt wurde, läßt sich die Residuenfunktion χ_1 aus (4.3) um eine (Kettenbruch-) Stufe weiter entwickeln. Dadurch ergibt sich eine rationale (Rest-) Funktion R_{l+1}, welche sich durch folgende Partitionierung von Q

$$Q = \left(\begin{array}{c|c} q_{11} & g^T \\ \hline h & \hat{Q} \end{array}\right) \tag{4.7}$$

($q_{11} \in \mathbb{R}$; $g,h \in \mathbb{R}^{s-l-1}$; $\hat{Q} \in \mathbb{R}^{(s-l-1)\times(s-l-1)}$) ausdrücken läßt (cf. Satz 3.7, Korollar 3.9).

Wir wollen nun auch die positive Semidefinitheit von $Q + Q^T$ bzgl. dieser Partitionierung beschreiben. Es ergeben sich daraus sofort analytische Vereinfachungen für den Fall, daß die Ordnung p des zugrunde liegenden RKV ß gerade (p=2l+2) ist.

Ferner liefern die Darstellungen für R_{l+1} und $Q + Q^T$ mittels $\hat{Q}$, g, h und q_{11} ein Indiz dafür, welche Eigenschaften die erste Spalte und Zeile von Q besitzen müssen, damit entweder die Bedingung (i) bzgl. R_{l+1} oder (ii) bzgl. der Partitionierung von Q aus Satz 4.2 bei Übergang von p=2l+2 auf p=2l+3 gültig bleiben.

Lemma 4.5

Für $n \geq 2$ habe $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Partitionierung (4.7).
Genau dann ist $Q + Q^T \geq 0$, wenn $q_{11} \geq 0$ und

$$\begin{cases} (\hat{Q} + \hat{Q}^T) - \frac{1}{2q_{11}} (g + h)(g + h)^T \geq 0 & \text{, falls } q_{11} > 0 \text{ ,} \\ (\hat{Q} + \hat{Q}^T) \geq 0 \text{ und } g + h = 0 & \text{, falls } q_{11} = 0 \text{ .} \end{cases} \tag{4.8}$$

Für einen Beweis siehe (zB.) Albert [1969], Theorem 1. □

In Korollar 3.9 wurde gezeigt, daß die Rest-Funktion R_{l+1} der Kettenbruch-Entwicklung der modifizierten Stabilitäts-Funktion Θ in der Form ($\lambda \in \mathbb{C}$)

$$R_{l+1}(\lambda) = q_{11} - g^T (\hat{Q} + \lambda \hat{I})^{-1} h \tag{4.9}$$

dargestellt werden kann.
Ist p gerade (bzw. $p = 2l+2$) und damit $q_{11} = 0$, so ist einerseits für algebraische Stabilität eine Residuenmatrix Q aus (4.7) mit

$$\hat{Q} + \hat{Q}^T \geq 0 \quad \text{und} \quad g = -h \tag{4.10}$$

notwendig. Andererseits fordert A-Stabilität (cf. Korollar 3.9)

$$\text{Re} \{ -g^T (\hat{Q} + \lambda \hat{I})^{-1} h \} > 0 \quad \text{für alle} \quad \text{Re}(\lambda) > 0. \tag{4.11}$$

Man erkennt somit, daß im Falle gerader Ordnung p die erste Zeile und Spalte von Q betragsgleiche Elemente mit verschiedenen Vorzeichen besitzen müssen, falls das betrachtete RKV algebraisch stabil ist.
Diese Eigenschaft muß für A-stabile RKV nicht erfüllt sein; man denke hierbei etwa an die Klassen $III_A(s)$ und $III_B(s)$ ($p = 2s-2$, Ehle [1969]), für die die Residuenmatrix Q die Gestalt ($l = k = s-2$)

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \alpha & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } \alpha \neq 0 \text{ hat .}$$

Ferner ist im Falle $g = 0$ oder $h = 0$ ($2 \leq p \leq 2s-2$) Vorsicht geboten, da die rationale Stabilitätsfunktion W aus (1.15) reduzibel wird. Zähler und Nenner besitzen dann den gemeinsamen Linearfaktor $|\hat{I} - z\hat{Q}|$.
Wie man sich leicht aufgrund von Satz 2.6 (cf. auch Korollar 4.3) überlegt, erhält man für algebraisch stabile RKV genau dann eine weitere Ordnungserhöhung ($p = 2l+2 \rightarrow p = 2l+3 = 2(l+1)+1$), falls $q_{11} = 0$, $g = -h = (-\xi_{l+1}, 0, .., 0)^T$ mit $\xi_{l+1}^2 = (4(4(l+1)^2-1))^{-1}$ und die

zugrunde liegende QF [c,b] ebenfalls die (Mindest-) Ordnung (2l+3) besitzt. Auch diese Eigenschaft ist für A-stabile Verfahren nicht notwendig, wie die Beispiele aus § 2 (S.-23-) und § 4 (S.-53-) zeigen. Die dort angegebene Verfahrens-Schar mit p=3 (k=1, Q=Y, l=0) führt für alle $y \neq 0$ auf eine A-verträgliche Approximation an exp(z) (A-Stabilität).

Bevor wir einige für die Normalform Y notwendigen Bedingungen A-stabiler RKV herleiten, soll das Hauptresultat (Satz 4.2, Korollar 4.3) dieses Paragraphen an einigen Beispielen erläutert werden.

Beispiele.

(1) Für $l = s-2$ sei die Normalform $Y = W^T BC\, W$ eines s-stufigen RKV (s beliebig) $\beta = [c,A,b]$ mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen gegeben durch (4.2) mit der Residuenmatrix

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad (a,b,c,d \in \mathbb{R}) \quad . \tag{4.12}$$

Die zugehörige Residuenfunktion besitzt die Darstellung

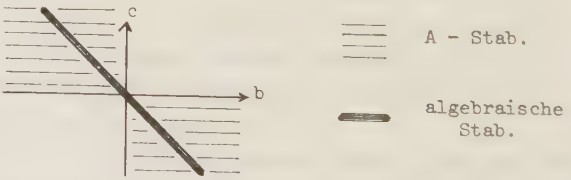
$$\chi_{s-2}(\lambda) = \xi_{s-2}^2 \cdot \frac{\lambda + d}{\lambda^2 + (a+d)\lambda + (ad-bc)} \quad .$$

Nach Satz 4.2 ist $\beta = [c,A,b]$ genau dann

(i) A-stabil, wenn $a,d \geq 0$ und $ad \geq bc$ (cf. § 3, S.-42-), bzw.

(ii) algebraisch stabil, wenn $a,d \geq 0$ und $ad \geq \frac{1}{4}(b+c)^2$.

Im Falle $\underline{a = 0}$ (p gerade, cf. (4.10),(4.11)) erhält man aufgrund von Korollar 4.3 A-stabile RKV der Ordnung p=2s-2, falls $d \geq 0$ und $bc \leq 0$, während algebraisch stabile RKV durch $d \geq 0$ und $b = -c$ charakterisiert sind.



Beachte ferner die Gültigkeit von $ad \geq \frac{1}{4}(b+c)^2 = \frac{1}{4}(b-c)^2 + bc \geq bc$.

(2) Betrachte das RKV $\mathcal{B} = [c,A,b]$ mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen, dessen Residuenmatrix Q für $l = s-3$ die folgende Form besitzt

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & -u_1 & -u_2 \\ u_1 & d_2 & p_3-u_3 \\ u_2 & p_3+u_3 & d_3 \end{pmatrix} \qquad (u_1,u_2,u_3,d_2,d_3,p_3 \in \mathbb{R}). \tag{4.13}$$

Die zugehörige Residuenfunktion erhält man hier zu

$$\chi_{s-3}(\lambda) = \frac{b_{s-3}^2 \cdot (\lambda^2 + (d_2+d_3)\lambda + (d_2d_3-p_3^2+u_3^2))}{\lambda^3 + (d_2+d_3)\lambda^2 + (u_1^2+u_2^2+u_3^2+d_2d_3-p_3^2)\lambda + (d_3u_1^2+d_2u_2^2-2p_3u_1u_2)}. \tag{4.14}$$

Eine etwas übersichtlichere Gestalt liefert hier die (Rest-) Funktion (cf. Bemerkung im Anschluß an Satz 3.4)

$$R_{s-2}(\lambda) = \frac{(u_1^2+u_2^2+u_3^2)\lambda + (d_3u_1^2+d_2u_2^2-2p_3u_1u_2)}{\lambda^2 + (d_2+d_3)\lambda + (d_2d_3-p_3^2+u_3^2)}. \tag{4.15}$$

Nach Korollar 3.9 ist $\chi_{s-3} \in \mathbb{P}$ genau dann, wenn $R_{s-2} \in \mathbb{P}$, sodaß $\mathcal{B}$ aufgrund von Satz 3.8 genau dann A-stabil ist, wenn

$$\begin{aligned} &d_2 + d_3 \geq 0 \,, \\ &d_2d_3 - p_3^2 + u_3^2 \geq 0 \,, \\ &d_3u_1^2 + d_2u_2^2 - 2p_3u_1u_2 \geq 0 \quad \text{und} \\ &d_2 + d_3 = 0 \;\Rightarrow\; u_1^2 + u_2^2 > 0 \,. \end{aligned} \tag{4.16}$$

Dagegen ist $\mathcal{B}$ genau dann algebraisch stabil, wenn $Q + Q^T \geq 0$, d.h. (cf. (4.10) oder Bsp. (1)) wenn

$$\begin{aligned} &d_2 \,,\, d_3 \geq 0 \quad \text{und} \\ &d_2d_3 - p_3^2 \geq 0 \,. \end{aligned} \tag{4.17}$$

Die (Neben-) Bedingungen (4.16) lassen durchaus ein negatives Diagonalelement d_i ($i \in \{1,2\}$) zu, während dies durch (4.17) ausgeschlossen wird.

(3) Für ein RKV $\mathcal{B} = [c,A,b]$ der Ordnung p mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Knoten habe die Normalform Y aus

(4.2) die Gestalt (k = $[(p-1)/2]$)

$$Y = \left[\begin{array}{c|c|c} \begin{matrix} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & 0 & -\xi_k \\ & & \xi_k & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & R^* \\ \hline \begin{matrix} 0 & \cdots & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} q_{11} \\ \end{matrix} & \bar{g}^T \\ \hline \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \hat{Q} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c|c} \begin{matrix} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & 0 & -\xi_k \\ & & \xi_k & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & R^* \\ \hline \begin{matrix} 0 & \cdots & 0 \end{matrix} & \begin{matrix} q_{11} \\ \end{matrix} & \bar{g}^T \\ \hline \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \hat{Q} \end{array}\right] =: \begin{bmatrix} \bar{K} & \bar{R} \\ \underline{0} & \hat{Q} \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

Die modifizierte Stabilitätsfunktion θ ergibt sich zu (cf. Lemma 3.3)

$$\theta(\lambda) = \left[(Y + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = |Y + \lambda I|^*/|Y + \lambda I| = \frac{\left|\bar{K} + \lambda \bar{I}\right|^*}{\left|\bar{K} + \lambda \bar{I}\right|} =: \theta^*(\lambda, q_{11}). \quad (4.19)$$

Wie man leicht sieht, ist $\theta \in \mathbb{P}$ (bzw. $\theta^* \in \mathbb{P}$) äquivalent zu $q_{11} \geq 0$. Damit ist das betrachtete RKV ß = [c,A,b]

(i) A-stabil genau dann, wenn $q_{11} \geq 0$ bzw.

(ii) algebraisch stabil genau dann, wenn (cf. Lemma 4.5)

$$\begin{aligned} &R^* = \underline{0} \ , \\ &q_{11} \geq 0 \quad \text{(A-Stabilität)}, \\ &\hat{Q} + \hat{Q}^T \geq g g^T/(2q_{11}) \ , \text{ falls } q_{11} > 0 \ , \\ &\hat{Q} + \hat{Q}^T \geq 0 \ , \text{ falls } q_{11} = 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Man erkennt hier besonders gut die gegenüber der A-Stabilität ($q_{11} \geq 0$) zahlreicheren weiteren Parameter-Restriktionen (4.20) zur Gewinnung eines algebraisch stabilen Verfahrens. Die modifizierte Stabilitätsfunktion θ^* ist unabhängig von R^*, allerdings unterliegt R^* bei bestehender A-Stabilität des RKV ß gewissen Einschränkungen, welche im nächsten Abschnitt untersucht werden sollen.

A-Stabilität und verwandte Fragen.

Die Normalform $Y = W^T B C W$ aus (4.2) mit l aus (4.1) diente als Ausgangsform, um für RKV ß mit positiven Gewichten die beiden linearen- bzw. nichtlinearen Stabilitätsbegriffe A- bzw. algebraische Stabilität formal miteinander zu vergleichen. Nun kann es für gewisse (auch A-stabile) RKV ß durchaus vorkommen, daß ß und das zu ß transponierte

RKV β^T unterschiedliche Ordnungen p bzw. p' besitzen, somit i.a. (4.1) und $k=[(p-1)/2]$ oder $k'=[(p'-1)/2]$ u.U. stark differieren. Als Beispiel dienen hier die 'transformierten SINGLY'-RKV von Burrage [1978].

O.B.d.A. betrachten wir den Fall $l = k' < k$; die andere Möglichkeit $l = k < k'$ läßt sich durch Betrachtung von β^T anstelle von β völlig analog behandeln.

Beispiel.

Betrachte das 3-stufige RKV $\beta = [c,A,b]$ mit einer positiven QF $[c,b]$ der Ordnung $p_{QF} = 3$, welches durch die Normalform

$$Y = \left(\begin{array}{c|cc} 0 & -\xi_1 & y \\ \hline \xi_1 & a & b \\ 0 & c & d \end{array}\right) , \quad a,b,c,d,y \in \mathbb{R}, \ \xi_1 := \frac{1}{2\sqrt{3}} , \tag{4.21}$$

erzeugt wird.

Das RKV β hat für alle $y \in \mathbb{R}$ die Ordnung $p=3$, denn es gilt

$$A\mathbf{1} = c \quad \text{und} \quad b^T A c = \mathbf{1}^T (Y + \tfrac{1}{2} E_{11}) R_2 = (\tfrac{1}{2}, -\xi_1, y)(\tfrac{1}{2}, \xi_1, 0)^T = \frac{1}{6} .$$

Somit ist $k=1$ und $l=0$. β ist genau dann A-stabil (Satz 3.8), wenn

$$ad \geq bc \quad \text{und} \quad -a \leq \frac{1}{\xi_1} cy \leq d . \tag{4.22}$$

Für $y=0$ erhält man die Bedingungen aus Beispiel (1). $p=3$ impliziert ferner $(Y)_{12} = -\xi_1$.

Die Normalform Y bzw. die Residuenmatrix $Q_{s-1} \in \mathbb{R}^{(s-1)\times(s-1)}$ wird also für den betrachteten Fall $l = k' < k$ folgende (Mindest-) Normalform besitzen

$$Y = \left[\begin{array}{ccc|c} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_1 & \ddots & 0 & \\ & \ddots & -\xi_{k-1} & R^* \\ 0 & & 0 & \\ & \xi_k & & \\ \hline & 0 & & Q_{s-k} \end{array}\right]_k = \left[\begin{array}{ccc|c} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_1 & \ddots & 0 & \\ & \ddots & -\xi_l & 0 \\ 0 & & 0 & \\ & \xi_l & & \\ \hline & 0 & & Q_{s-l} \end{array}\right]_l \tag{4.23}_{a,b}$$

mit

$$Q_{s-1} = \left[\begin{array}{ccc|c} 0 & -\xi_{l+1} & & \\ \xi_{l+1} & \ddots & 0 & \\ & \ddots & -\xi_{k-1} & (q_{ij})_{i=1}^{s-1} \ \ {}_{j=k+1}^{s} \\ 0 & & 0 & \\ & \xi_k & & \end{array}\right] . \tag{4.24}$$

Im folgenden wollen wir den Einfluß der A-Stabilität eines RKV ß der Ordnung p auf die Teilmatrix R^* von Y studieren. Für algebraisch stabile Verfahren der Ordnung p war $R^* = -\xi_k \mathbb{1}_k \mathbb{1}_k^T$ notwendig (cf. Satz 2.6, $\mathbb{1}_k := e_k$).

Lemma 4.6

Das RKV ß der Ordnung p mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen habe die Normalform Y aus $(4.23)_a$ mit

$$R^* =: (r_1^T, \ldots, r_k^T)^T \quad , \quad (k=[(p-1)/2]). \tag{4.25}$$

Dann hat die Stabilitätsfunktion W von ß eine Darstellung der Form

$$W(z) = \frac{\sum_{i=0}^{k} p_i(z)\, \phi_{i+1}(z)}{\sum_{i=0}^{k} p_i(-z)\, \phi_{i+1}(z)} \quad , \tag{4.26}$$

mit

$$\begin{aligned}
\phi_{i+1}(z) &:= \sqrt{(2i+1)!\binom{2i}{i}}\, z^{k-i} \left| \frac{-z\, r_{i+1}^T}{(I - zQ_{s-k})^*} \right| \quad , \; i=0,..,k-1, \\
\phi_{k+1}(z) &:= \sqrt{(2k+1)!\binom{2k}{k}}\, \left| I - zQ_{s-k} \right| \quad , \\
(I - zQ)^* &:= (I - zQ)_{/\text{ohne erste Zeile}} \quad , \\
p_i(z) &:= \binom{2i}{i}^{-1} \sum_{j=0}^{i} \binom{2i-j}{i-j} \frac{1}{j!} z^j \quad (i \geq 0) \quad .
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Die Polynome p_i $(i \geq 0)$ sind die Nominator-Polynome der i-ten diagonalen Padé-Approximation an exp(z) und können rekursiv bestimmt werden durch $(z \in \mathbb{C})$

$$\begin{aligned}
p_0(z) &= 1 \quad , \quad p_1(z) = 1 + \frac{1}{2} z \\
p_{i+1}(z) &= p_i(z) + \xi_i^2 z^2 p_{i-1}(z) \quad , \; i=1,2,\ldots \quad .
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Die Polynome ϕ_{i+1} haben den grad $\phi_{i+1} = s-i$ $(i=0,\ldots,k)$.
Ferner ist

$$\phi_{i+1}(0) = \begin{cases} 0 & \text{für } i=0,\ldots,k-1 \\ \sqrt{(2k+1)!\binom{2k}{k}} & \text{für } i=k \end{cases} \tag{4.29}$$

und, falls die Normalform $(4.23)_b$ vorliegt, wegen $r_1^T = \ldots = r_{l-1}^T = 0^T$

$$\phi_{i+1} \equiv 0 \quad \text{für } i=0,\ldots,l-2 \quad . \tag{4.30}$$

Beweis von Lemma 4.6. Aufgrund der Voraussetzungen läßt sich W durch $Y = W^T B C W$ wie folgt ausdrücken

$$W(z) = \frac{|I - z(Y - \frac{1}{2} E_{11})|}{|I - z(Y + \frac{1}{2} E_{11})|} =: \frac{N(z)}{D(z)} . \tag{4.31}$$

Dabei haben N bzw. D die Gestalt

$$\begin{matrix} N(z) \\ D(z) \end{matrix} \Big| = \left| \begin{array}{cccc|c} 1\pm\frac{1}{2}z & \xi_1 z & & 0 & \\ -\xi_1 z & 1 & \ddots & & -zR^* \\ & \ddots & \ddots & \xi_{k-1} z & \\ 0 & & -\xi_{k-1} z & 1 & \\ \hline & & & -\xi_k z & I - zQ \end{array} \right| \Big|_k . \tag{4.32}$$

Durch spaltenweises Entwickeln dieser Determinanten bis zur Spalte k, wobei die Zwischenresultate fortlaufend einzusetzen sind, erhält man eine Entwicklung der Form (4.26). Dabei ergeben sich die Koeffizienten

$$C_{ik} := \prod_{j=i+1}^{k} \xi_j \quad \text{mit} \quad \xi_j = (2(4j^2-1)^{1/2})^{-1} \quad (j \geq 1) .$$

Da $C_{ok} = \prod_{j=1}^{k} \xi_j = \prod_{j=1}^{k} \frac{1}{2\sqrt{4j^2-1}} = \frac{1}{\sqrt{(2k+1)!\binom{2k}{k}}}$, erhält man

$$C_{ik} = C_{ok}/C_{oi} = \left(\frac{(2i+1)!\binom{2i}{i}}{(2k+1)!\binom{2k}{k}} \right)^{1/2} \quad \text{für } i=0,\ldots,k . \tag{4.33}$$

Durch Erweiterung von N(z) und D(z) mit C_{ok}^{-1} ergibt sich schließlich die behauptete Darstellung (4.26) von W mit (4.27). □

Für $P^* = -\xi_k 1_k 1_k^T = \begin{pmatrix} 0 \\ -\xi_k \end{pmatrix}$ läßt sich aus Lemma 4.6 ein interessanter Zusammenhang mit einem Ergebnis aus Halmos[1982] herleiten. Da hier

$$r_1^T = r_2^T = \ldots = r_{k-1}^T = \underline{0}^T \quad \text{und} \quad r_k^T = (-\xi_k, 0, \ldots, 0)^T ,$$

ergibt sich aus (4.27)

$$\phi_{i+1} = 0 \quad , \; i=0,\ldots,k-2 ,$$

$$\phi_k(z) = ((2k-1)!\binom{2k-2}{k-1})^{1/2} z^2 \xi_k^2 |\hat{I} - z\hat{Q}| ,$$

$$\phi_{k+1}(z) = ((2k+1)!\binom{2k}{k})^{1/2} |I - zQ| .$$

Damit erhält man für die Stabilitätsfunktion W aus (4.26) eine Darstellung der Form ($z\in\mathbb{C}$)

$$W(z) = \frac{|I - zQ|\ p_k(z) + \xi_k^2 z^2\ |\hat{I} - z\hat{Q}|\ p_{k-1}(z)}{|I - zQ|\ p_k(-z) + \xi_k^2 z^2\ |\hat{I} - z\hat{Q}|\ p_{k-1}(-z)} \quad . \tag{4.34}$$

$|I-zQ|$ bzw. $|\hat{I}-z\hat{Q}|$ sind Polynome vom Grad $(s-k)$ bzw. $(s-k-1)$; ferner existiert zu beliebigen Polynomen f,g mit $\mathrm{grad}(f)\le\alpha$ und $\mathrm{grad}(g)\le\alpha-1$ eine Matrix $Q\in\mathbb{R}^{\alpha\times\alpha}$ mit $f(z)=|I-zQ|$ und $g(z)=|\hat{I}-z\hat{Q}|$. Damit folgt aus einer Charakterisierung aller rationalen Approximationen an $\exp(z)$ (cf. Hairer[1982], Theorem 1 und Corollary 3), daß mittels W aus (4.31) und

$$Y := \begin{pmatrix} 0 & -\xi_1 & & \\ \xi_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & 0 & -\xi_k \\ & & \xi_k & \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \\ k \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \\ \\ \\ k \end{matrix}$$

alle rationalen Approximationen an $\exp(z)$ der Ordnung $p\ge 2k+1$ dargestellt werden können. Damit hat man eine weitere Verifizierung der Aussage von Satz 3.7.

Korollar 4.7

Zu jeder rationalen Approximation an $\exp(z)$ der Ordnung p existiert ein RKV derselben Ordnung mit positiven Gewichten.

Bei Wahl einer festen $\mathbb{S}$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen ist die Zuordnung sogar eindeutig.
Erfüllt das in Lemma 4.6 vorgelegte RKV weiter das Gleichungs-System D(n), so hat W aus (4.26) aufgrund von $r_{i+1}^T = \underline{0}^T$ $(i=0,..,n-2)$ die restriktivere Darstellung

$$W(z) = \frac{\sum_{i=n^*}^{k} {}^*p_i(z)\ \phi_{i+1}(z)}{\sum_{i=n^*}^{k} {}^*p_i(-z)\ \phi_{i+1}(z)} \quad , \text{ mit } n^* := \min\{n,k-1\} \ . \tag{4.35}$$

Satz 4.8

Ein RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten hat eine Normalform $Y = W^T BC\ W$ der Gestalt $(4.23)_a$ mit

$$R^* = \begin{pmatrix} & & 0 & \\ & & & \ddots \\ & & & \\ -\xi_k & & & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{k\times(s-k)} \quad . \tag{4.36}$$

Ist p gerade (p = 2k+2), so hat R^* sogar eine Form

$$R^* = \begin{pmatrix} & & 0 & \\ & & & \ddots \\ & & 0 & \\ -\xi_k & & 0 & \end{pmatrix} \quad . \tag{4.37}$$

Beweis. Das RKV der Ordnung p erfüllt die Bedingungs-Gleichungen E(m,n) für alle $m+n\leq p$. Mit $c^{(\nu)} := (c_1^\nu,\ldots,c_s^\nu)^T$ $(\nu\in\mathbb{N})$ ist E(m,n) äquivalent zu

$$c^{(\nu-1)^T} BA\, c^{(\mu-1)} = \frac{1}{\mu(\mu+\nu)} \quad \text{für alle } \nu\leq m,\ \mu\leq n. \tag{4.38}$$

Mittels der orthonormierten V-Transformations-Matrix W erhält man aufgrund von $V = WR$ und $R = (r_{ij})$ mit

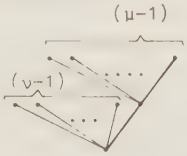
$$r_{ij} = \frac{\sqrt{2i-1}}{j}\binom{j}{i}\binom{j+i-1}{i}^{-1} \quad , \quad 1\leq i\leq j\leq\left[\frac{p+1}{2}\right],$$

(cf. Hairer-Wanner[1981]) die zu (4.38) äquivalente Darstellung

$$r_\nu^T \left(Y + \frac{1}{2} E_{11}\right) r_\mu = \frac{1}{\mu(\mu+\nu)} \quad \text{für alle } \nu\leq m,\ \mu\leq n\ ,$$

wobei r_μ der μ-te Spaltenvektor der Cholesky-Matrix R bezeichnet. Für ungerade Ordnung p (p=2k+1) ergibt sich daraus für R^* die Form (4.36), während für gerades p (p=2k+2) man die Form (4.37) erhält. □

Die Bedingungen (4.38) spiegeln für $\nu\leq m$ und $\mu\leq n$ die Bäume



wieder.

Ein alternativer Beweis kann mittels Lemma 4.6 geführt werden. Dabei ist es möglich, W aus (4.26) aufgrund der Rekursionsformel (4.28) der Polynome p_i $(i\geq 0)$ auf eine Form

$$W(z) = \Big(\sum_{i=k-1}^{k} p_i(z)\,\Delta_{i+1}(z)\Big)\Big/\Big(\sum_{i=k-1}^{k} p_i(-z)\,\Delta_{i+1}(z)\Big)$$

zu bringen. Ein Vergleich mit (4.34) bzw. Theorem 1 und Corollary 3 aus Hairer[1982] liefert schließlich die behauptete Form für R^*.

Infolge von Ordnungsbedingungen oder A-Verträglichkeit der Stabilitätsfunktion W werden i.a. weitere Bedingungen an R^* und Q aus (4.36)/(4.37) bzw. $(4.23)_{a,b}$ gestellt werden. Da bisher eine Charakterisierung der Ordnung eines RKV durch die Bedingungsgleichungen B, C, D und E aus (1.18) fehlt, sind diese Bedingungen nur in einzelnen Fällen anzugeben.
Geht man von der allgemeinen Normalform (4.2) (oder auch $(4.23)_b$) aus, so ist aus konstruktiven Gründen die Frage interessant, ob Bedingungen an die Residuenmatrix Q angegeben werden können, sodaß die Stabilitätsfunktion W des resultierenden RKV R für $|z|\to\infty$ betragsmäßig gegen 0 geht ('Stabilität bzw. Dämpfung im Unendlichen', cf. [7.16]ff.). Diagonale Padé-Approximationen an exp(z) besitzen diese Eigenschaft nicht, jedoch alle Padé-Approximationen an exp(z) unterhalb der Diagonalen.
Ist das RKV zusätzlich algebraisch stabil (l=k, $Q+Q^T\geq 0$ und positive QF [c,b]), so wird R auch als 'extrem stabil' bezeichnet (cf. Burrage-Butcher[1980]).

Satz 4.9

Ein RKV R mit der allgemeinen Normalform (4.2) bzw. $(4.23)_b$ besitzt genau dann ein 'Dämpfung im Unendlichen' ($\lim W(z)=0, |z|\to\infty$), wenn

$$\det(Q)\neq 0 \text{ und } \det(Q) = \frac{1}{2(2l+1)}\det(\hat{Q}) \quad . \tag{4.39}$$

Falls l=s-1 setze $\det(\hat{Q}):=1$. Für algebraisch stabile RKV kann l=k=$[(p-1)/2]$ gewählt werden, sodaß aus dem Ansatz (4.2) mit (4.39) und einer fest vorgegebenen positiven QF alle extrem stabilen RKV charakterisiert sind. Für die Klasse der $I_A(s),II_A(s)$-Verfahren (cf. Ehle [1969]) ist aufgrund von p=2s-1 bzw. k=s-1 der verbleibende Parameter somit als 1/(2(2s-1)) zu bestimmen.

Beweis von Satz 4.9. Da A regulär ist, erhält man

$$\lim_{|z|\to\infty} W(z) = 1 - b^T A^{-1} \mathbb{1} = 1 - X_{11}^{-1} \text{ , wobei } X := Y + \frac{1}{2} E_{11} .$$

Nun ist $b^T A^{-1} \mathbb{1} = 1$ genau dann, wenn $|X^*| = 0$ und $|X| \neq 0$ mit $X^* = X^*(Q) = E_{11} - FX(Q)F$, $F := \mathrm{diag}(1,-1,1,\ldots,\pm 1) \in \mathbb{R}^{s\times s}$. X^* ist die Normalform RK-Matrix A^* des zu ß gespiegelten RKV $ß^*$ (cf.(1.23)). Damit ist $|X^*(Q)| = |X(-Q^T)|$, und mittels der Schurschen Determinanten-Formel erhält man

$$\begin{aligned} |X(Q)| &= \frac{1!}{(21)!} \left(|Q| + \delta|\hat{Q}|\right) \quad \text{und} \\ |X(-Q^T)| &= \frac{1!}{(21)!} \left(|Q| - \delta|\hat{Q}|\right) \quad \text{mit } \delta = \delta(1) := \frac{1}{2(21+1)}. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Daraus folgt die Behauptung. □

Wie aus dem Beweis (cf.(4.40)) zu entnehmen ist, läßt sich der Grenzwert der Stabilitätsfunktion W eines RKV ß mit der Normalform Y aus (4.2) explizit angeben. Es ist

$$\lim_{|z|\to\infty} W(z) = \frac{|Q| - \frac{1}{2(21+1)} |\hat{Q}|}{|Q| + \frac{1}{2(21+1)} |\hat{Q}|} , \tag{4.41}$$

wobei für $l=s-1$ $\det(\hat{Q}) := 1$ gesetzt wird.
Ein alternativer Beweis von Satz 4.9 ohne die Verwendung von gespiegelten RKV ist mittels der Schurschen Determinanten-Formel für partitionierte Matrizen (cf. Barnett[1971],S.-97-) möglich. Bezeichnet K die linke obere $l\times l$-Teilmatrix von $X = Y + \frac{1}{2} E_{11}$, so gilt $\det(K) = 1!/(21)!$, $Q_{11}^{adj} = \det(\hat{Q})$, $(K^{-1})_{11} = 2(21-1)$, woraus sich mit $\delta = \delta_1 = (2(21+1))^{-1}$ die Formeln (4.40) ergeben.

In den Paragraphen 2, 3 und 4 wurde eine Theorie behandelt, die es ermöglichte, für ein RKV gegebener Ordnung Kriterien für A- bzw. algebraische Stabilität anzugeben. Dabei spielte die (um $\frac{1}{2} \mathbb{1} b^T$) geshiftete RK-Matrix C eine ausgezeichnete Rolle, sodaß einerseits die A-Stabilität durch eine reell-positive Funktion $\theta = \theta(\lambda)$ charakterisiert werden konnte und andererseits die Grund- bzw. Normalform S bzw. Y von C vereinfachte Gestalt annahmen. Für RKV mit positiven Gewichten konnten die einzelnen Kriterien schließlich im wesentlichen auf Bedingungen

an die in S bzw. Y auftretende Residuenmatrix Q reduziert werden (cf. Satz 2.6, Korollar 3.15).
Diese Ergebnisse gestatten nun eine Reduktion einer von Hairer[1982] geäußerten Vermutung, daß es zu jedem A-stabilen RKV mit positiven Gewichten und der Ordnung p ein algebraisch stabiles RKV $\tilde{B}$ mit derselben Ordnung und Stabilitätsfunktion gibt.

Lemma 4.10

Die beiden folgenden Aussagen sind äquivalent :

(i) Zu jedem A-stabilen RKV B der Ordnung p mit positiven Gewichten existiert ein algebraisch stabiles RKV $\tilde{B}$ mit derselben Ordnung und Stabilitätsfunktion W (Vermutung von Hairer).

(ii) Zu jedem $Q\in\mathbb{R}^{l\times l}$ mit $f_Q\in\mathbb{P}$, wobei $f_Q(\lambda):=[(Q+\lambda I)^{-1}]_{11}$, existiert ein $R\in\mathbb{R}^{l\times l}$ mit $f_R = f_Q$ und $R + R^T \geq 0$.

Beweis. Ist B ein RKV der Ordnung p mit positiven Gewichten, so existiert nach Satz 3.7 eine Matrix $Y\in\mathbb{R}^{s\times s}$ und $Q\in\mathbb{R}^{k\times k}$ ($k := [(p-1)/2]$), sodaß Y eine Form (4.2) mit l=k besitzt und $\theta(\lambda) = [(Y + \lambda I)^{-1}]_{11} = \Phi_{k-1}(\lambda) + \chi_k(\lambda)$ mit $\chi_k(\lambda)=\xi_k^2[(Q + \lambda I)^{-1}]_{11}$.
Umgekehrt erzeugt Y bei gegebener positiver QF (der Mindest-Ordnung p) ein RKV der Ordnung p (cf. Lemma 2.5). Nach Satz 3.8 ist B genau dann A-stabil, wenn $\chi_k\in\mathbb{P}$. Die Existenz eines algebraisch stabilen RKV $\tilde{B}$ mit invarianter Ordnung und Stabilitätsfunktion θ (bzw. W) ist genau dann gesichert, wenn es eine Matrix R derselben Dimension wie Q gibt, sodaß $[(Q + \lambda I)^{-1}]_{11} = [(R + \lambda I)^{-1}]_{11}$ und $R + R^T \geq 0$ (cf. Satz 2.6). □

Wir werden im folgenden zu gegebenem $Q\in\mathbb{R}^{l\times l}$ ($l\in\mathbb{N}$) ein $R\in\mathbb{R}^{l\times l}$ konstruieren, das den Bedingungen aus Lemma 4.10 (ii) genügt.
Eine für unseren Ansatz wesentliche Charakterisierung reell-positiver Funktionen der Form $f_Q(\lambda) = [(Q + \lambda I)^{-1}]_{11} = e_1^T (Q + \lambda I)^{-1} e_1$ ($\lambda\in\mathbb{C}$) liefert ein Satz aus der Kontrolltheorie (cf. Theorem 3, Anderson[1967]).

Satz 4.11

Eine irreduzible Transferfunktion f der Form $f(\lambda) = f_Q(\lambda) = e_1^T(Q + \lambda I)^{-1}e_1$ $(Q \in \mathbb{R}^{n\times n})$ ist genau dann reell-positiv, wenn es eine symmetrische, positiv definite Matrix P gibt mit

$$PQ + Q^TP \geq 0 \quad \text{und} \qquad Pe_1 = e_1 \quad . \tag{4.42}$$

Die positiv definite Matrix P besitzt aufgrund der zweiten Gleichung von (4.42) die Gestalt

$$P = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{P} \end{array}\right)$$

mit $\hat{P} > 0$. Somit existiert eine Cholesky-Zerlegung von P :

$$P = L^TL =: P^{1/2^T}P^{1/2} \quad \text{mit regulärem} \quad P^{1/2} = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & \hat{P}^{1/2} \end{array}\right) . \tag{4.43}$$

Setzt man

$$R := P^{1/2}Q\,P^{-1/2} \qquad (P^{-1/2} := (P^{1/2})^{-1}) \quad , \tag{4.44}$$

so ist die erste Gleichung aus (4.42) äquivalent zu $R + R^T \geq 0$. Ferner ist für alle zulässigen $\lambda \in \mathbb{C}$ mit R aus (4.44)

$$f_R(\lambda) = e_1^T(R + \lambda I)^{-1}e_1 = e_1^T(P^{1/2}Q\,P^{-1/2} + \lambda I)^{-1}e_1$$
$$= e_1^TP^{1/2}(Q + \lambda I)^{-1}P^{-1/2}e_1 = e_1^T(Q + \lambda I)^{-1}e_1 = f_Q(\lambda) \quad ,$$

sodaß die Transfer- (bzw. Residuen-) Funktion f_Q bei Übergang zu R aus (4.44) invariant bleibt.

Für irreduzible Stabilitätsfunktionen θ (bzw. W) eines vorgegebenen s-stufigen RKV ß ist somit aufgrund von Lemma 4.10 und Satz 4.11 die Vermutung von Hairer bewiesen.
Die Irreduzibilitäts-Voraussetzung kann sogar weiter abgeschwächt werden. Ist θ reduzibel, so erkennt man aufgrund der Darstellung (3.20), daß auch die Residuenfunktion f_Q, welche θ über die Kettenbruchentwicklung $\theta = \Phi_{k-1} + \xi_k^2 f_Q$ (cf.(3.27)) erzeugt, reduzibel ist, und zwar um dieselben Faktoren wie θ.
Damit existiert zu f_Q mit $Q \in \mathbb{R}^{l\times l}$ $(l=s-k)$ ein $Q^* \in \mathbb{R}^{(l-r)\times(l-r)}$, so daß

$$(1)\quad f_Q(\lambda) = \left[(Q + \lambda I)^{-1}\right]_{11} = \frac{r_{l-1}(\lambda)}{s_l(\lambda)} = \frac{r_{l-r-1}(\lambda)\ \prod_{\nu=1}^{r}(\lambda + \lambda_\nu)}{s_{l-r}(\lambda)\ \prod_{\nu=1}^{r}(\lambda + \lambda_\nu)}$$

$$\equiv \frac{\ddot{r}_{l-r-1}(\lambda)}{s_{l-r}(\lambda)} = f_{Q^*}(\lambda) \quad (\lambda \in \mathbb{C} \text{ und } \lambda \notin \mathrm{spec}(-Q^*)) \text{ und}$$

(2) f_{Q^*} irreduzibel ist.

Die Matrix Q^* ist eine Teilmatrix von Q, wobei Q und Q^* in folgender Weise zusammenhängen

$$Q = \begin{array}{|c|c|} \hline Q^* & 0 \\ \hline 0 & \begin{matrix}\lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_r\end{matrix} \\ \hline \end{array} \quad \begin{matrix} l-r \\ \Big\} \\ r \\ \Big\} \\ l \end{matrix} \qquad (4.45)$$

$\overbrace{\qquad l-r \qquad}$ $\overbrace{\qquad r \qquad}$

Haben Zähler und Nenner von f_Q eine komplexe NST $\lambda_\nu (\nu \in \{1,\dots,r\})$, so tritt aufgrund der reellen Koeffizienten des rationalen Polynoms f_Q auch dessen konjugiert komplexe NST $\bar{\lambda}_\nu$ als Faktor auf, insgesamt also

$$(\lambda^2 + 2\mathrm{Re}(\lambda_\nu)\lambda + |\lambda_\nu|^2).$$

Dies soll in der rechten unteren Teilmatrix von Q aus (4.45) durch die 2x2-Matrix

$$\begin{pmatrix} \mathrm{Re}\lambda_\nu & -\mathrm{Im}\lambda_\nu \\ \mathrm{Im}\lambda_\nu & \mathrm{Re}\lambda_\nu \end{pmatrix}$$

berücksichtigt werden.

Die reelle Positivität von f_Q fordert Eigenwerte $\lambda_\nu = \lambda_\nu(Q)$ mit $\mathrm{Re}\,\lambda_\nu(Q) \geq 0$ ($\nu = 1,\dots,l$, cf. Korollar 3.15), so daß wir aufgrund obiger Herleitung bzgl. der irreduziblen Stabilitätsfunktion $\theta^* = \phi_{k-1} + \xi_k^{-} f_{Q^*}$ bzw. der irreduziblen Residuenfunktion f_{Q^*} die Verifizierung der Hairer-Vermutung in ihrer ursprünglichen Formulierung erhalten.

Satz 4.13

Die Vermutung von Hairer ist richtig.

Zu jedem A-stabilen RKV mit positiven Gewichten existiert damit ein algebraisch stabiles RKV mit derselben Ordnung und Stabilitätsfunktion.

Bemerkungen. Die in (4.42) geforderte symmetrische, positiv definite Matrix P hat für beliebige A-stabile, s-stufige RKV der Ordnung p (bis auf etwaige Zeilen- und Spaltenvertauschungen) die Gestalt

$$P = \left[\begin{array}{c|c|c} 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \hat{P} & 0 \\ \hline 0 & 0 & I_r \end{array}\right] \begin{array}{c} 1 \\ l-r-1 \\ r \end{array} \quad \text{mit} \quad \hat{P} = \hat{P}^T > 0 \,.$$

$\qquad\qquad\quad 1$

Für Verfahren der Ordnungen $p \geq 2s-6$ (bzw. $l=1,2,3$, $l=4$ und $q_{11}=0$) konnte die Vermutung von Hairer auf konstruktive Art und Weise verifiziert werden (cf. Hairer[1982]).

Ist ß bereits algebraisch stabil, so kann in obiger Konstruktion für R $P=I$ oder allgemeiner P von Diagonalgestalt mit positiven Elementen gewählt werden.

Interpretiert man rationale Funktionen f_Q der hier betrachteten Form als Transferfunktionen von (diskreten) Kontrollsystemen, so ist die Irreduzibilität von f_Q äquivalent zur Steuerbarkeit und Beobachtbarkeit des beschriebenen Systems (cf. Kalman[1963]).

Im nächsten Paragraphen befassen wir uns mit Strukturaussagen für die erzeugende RK-Matrix C, falls die Lyapunov-Matrizengleichung

$$BC + C^TB = L^TL$$

für ein $L \in \mathbb{R}^{s\times s}$ und $B=\mathrm{diag}(b_1,\ldots,b_s)$ (Gewichte des RKV) erfüllt ist. Aufgrund der Charakterisierung von reell-positiven Funktionen durch ein Theorem von Anderson (cf. Satz 4.11) ist es nun möglich, den Unterschied von linearer und nichtlinearer Stabilität für RKV mittels einer Bedingung an die Form einer Lösungsmatrix einer Lyapunov-Matrizengleichung auf eine neue Art und Weise zu charakterisieren (Korollar 5.6).

§ 5 Strukturaussagen

Verschiedene Gründe lassen eine Untersuchung der Struktur und darüber hinaus der Eigenwert-Verteilung der RK-Matrix A bzw. der geshifteten RK-Matrix $C=A-\frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$ als interessant erscheinen. Bereits in § 3 konnten A-stabile RKV über die Eigenwertverteilung einer Residuenmatrix $\hat{R}$ charakterisiert werden (Korollar 3.15). Eine dazu äquivalente Bedingung in Form einer Lösbarkeitsbedingung einer Lyapunov Matrizengleichung mit positiv semidefiniter rechter Seite wurde durch Satz 4.11 bereitgestellt. Daraus ergibt sich nun eine weitere Möglichkeit, den Unterschied von linearem (A)- und nichtlinearem (algebraischen) Stabilitätsbegriff zu charakterisieren (Korollar 5.6).
Die Lage der Eigenwerte (von A bzw. C) spielen ferner bzgl. dem Aufwand und der Konvergenzgeschwindigkeit eines für implizite RKV notwendigen Iterationsverfahrens zur Ermittlung der Zwischenlösungen $Y_1,\ldots,Y_s$ (cf.(1.7)) eine wesentliche Rolle. SINGLY-RKV (Burrage[1978]) sind Verfahren, deren RK-Matrix A einen s-fachen reellen Eigenwert λ besitzt, sodaß bei Implementierung dieser Verfahren ein relativ geringer Iterationsaufwand entsteht (cf. Burrage[1978]). Allerdings muß dafür eine (Konsistenz-) Ordnungsschranke in der Größenordnung der jeweiligen Stufenzahl in Kauf genommen werden. Für allgemeine implizite RKV kann eine (Ähnlichkeits-) Transformation der RK-Matrix A durchgeführt werden (Butcher[1976]), sodaß die resultierende Vorschrift (1.7) geringeren Iterationsaufwand besitzt. Daraus ist zu ersehen, daß Verfahren mit nur linearen Elementarteilern (ET) hier leichte Vorteile bzgl. dem Aufwand besitzen. SINGLY-RKV mit annehmbarer Konsistenzordnung (p=s) führen jedoch auf Jordansche Normalformen mit fast vollbesetzter Nebendiagonale (nichtlineare ET, Satz 5.9).

Lyapunov Matrizengleichung.

Als eine Hauptquelle für Strukturaussagen über A und C erweisen sich die Existenz-und Eindeutigkeitsbedingungen für die Lösung einer Lyapunov-Matrizengleichung (cf. Barnett[1971], Chpt.4)

$$X D + D^T X = -Q \quad \text{mit} \quad Q \geq 0 \ . \tag{5.1}$$

Dabei sind D und $Q=Q^T$ zwei gegebene reellwertige n×n-Matrizen und X

eine gesuchte symmetrische n×n-Lösungsmatrix. Ist Q positiv definit, so läßt sich leicht zeigen (Barnett[1971], Theorem 4.2), daß es genau dann eine positiv definite Lösung X gibt, wenn alle Eigenwerte von D in $\mathbb{C}_-$ liegen, D also eine stabile Matrix ist ('Zweite-' oder auch 'direkte Methode von Lyapunov').
Der semidefinite Fall der Lyapunov-Matrizengleichung (5.1) ($Q=Q^T\geq 0$) wurde ebenfalls in zahlreichen Arbeiten untersucht. Notwendig und hinreichende Bedingungen für die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen findet man u.a. in Carlson-Schneider[1964], Carlson[1965], Wimmer[1974], Snyders-Zakai[1970], sowie Anwendungen dieser zweiten Methode von Lyapunov in der Monographie Müller[1977].
Setzt man in (5.1) für D die geshiftete RK-Matrix (-C) aus (1.6), so läßt sich die Stabilitätsmatrix M aus (1.19) als Lyapunov-Matrizengleichung (LM) interpretieren. Insbesondere wenn M positiv semidefinit ist, existiert eine Matrix Q mit

$$B\,C + C^TB = Q \quad \text{und} \quad Q = Q^T \geq 0 \quad (B=\mathrm{diag}(b_1,..,b_s)). \tag{5.2}$$

Dabei sei implizit angenommen, daß M von einem gegebenen RKV ß erzeugt wird. Auch die mittels A formulierte Stabilitätsmatrix $M = BA+A^TB-bb^T$ läßt sich als LM interpretieren. Die Störung durch das dyadische Produkt bb^T bringt jedoch Probleme für eine Herleitung von Eigenwertaussagen für A mit sich.
Es läßt sich aber unter relativ geringen Voraussetzungen ein Zusammenhang beider LM ((5.2) und (5.2) mit A statt C) herstellen.

Satz 5.1

Sei ß=[c,A,b] ein RKV der Ordnung $p\geq 3$ mit C(1), D(1) und nichtverschwindenden Gewichten. Dann ist $M = BC + C^TB$ genau dann positiv semidefinit, wenn $M + bb^T = BA + A^TB$ positiv semidefinit ist.

Damit können Strukturaussagen für die geshiftete RK-Matrix C, die im folgenden mittels der LM (5.2) hergeleitet werden, analog auch auf A übertragen werden, falls ß=[c,A,b] die Voraussetzungen erfüllt. Hat ß sogar positive Gewichte (B>0), so kann die Bedingungsgleichung C(1) weggelassen werden, da sie bereits aufgrund von Lemma 2.3 (i) erfüllt ist.

Beweis. Sei $R=[c,A,b]$ der Ordnung $p\geq 3$ mit $C(k)$, $D(k)$ und $b_i\neq 0$ $(i=1,\ldots,s)$ gegeben. Mit $W:=(p_{j-1}(c_i))_{i,j=1}^{s}$, wobei $p_i(t)$ das i-te, auf [0,1] orthonormierte Legendre-Polynom bezeichnet, gilt ($k=[(p-1)/2]$, Hairer-Wanner[1981], Lemma 1)

$$W^T B W = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ \hline 0 & & D_{s-2} \end{array}\right) \quad \text{mit} \quad D_{s-2}\in\mathbb{R}^{(s-2)\times(s-2)} .$$

Damit ist einerseits (cf. Satz 2.2)

$$W^T M W = W^T BCW + (W^T BCW)^T = Y + Y^T = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 0\ldots 0 \\ \hline 0 & \\ \vdots & \hat{Y}+\hat{Y}^T \\ 0 & \end{array}\right)$$

und andererseits

$$W^T(M + bb^T)W = W^T M W + W^T bb^T W = W^T M W + E_{11} = \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0\ldots 0 \\ \hline 0 & \\ \vdots & \hat{Y}+\hat{Y}^T \\ 0 & \end{array}\right) ,$$

woraus die Behauptung folgt.

□

Wir werden im folgenden Strukturaussagen für die geshiftete RK-Matrix $C=A-\frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$ herleiten. Diese Restriktionen an C sind notwendig, falls die LMU (5.1) mit $Q\geq 0$ und $B>0$ erfüllt ist (algebraisch stabile Verfahren). Man beachte hierbei die Aussagen von Korollar 3.15 für $Q=Y$ bzw. $Q=C$ (und $B>0$).

Satz 5.2

Das RKV $R=[c,A,b]$ sei algebraisch stabil. Dann gilt für die Eigenwerte λ_i der geshifteten RK-Matrix C

(i) $\operatorname{Re}\lambda_i(C)\geq 0$, $i=1,\ldots,s$;

(ii) $\lambda_i(C)$ mit $\operatorname{Re}\lambda_i = 0$ $(i\in\{1,\ldots,s\})$ haben zugehörige lineare Elementarteiler (EI). (5.3)

Beweis. Durch Interpretation der Stabilitätsmatrix M als Lyapunov-Matrizengleichung (cf. (5.2)) folgen beide Aussagen aus Carlson-Schneider[1963] bzw. Snyders-Zakai[1970], Corollary III.

□

Bemerkungen.

(1) Für RKV mit positiven Gewichten kann die Normalform Y ähnlich zu C gewählt werden ($Y=W^TBCW=W^{-1}CW$), sodaß obige und nachfolgende Eigenwertaussagen auch für Y gelten (ebenso für A bzw. $X=Y+\frac{1}{2}E_{11}$, Satz 5.1).

(2) Bezeichnet man mit r(C) die Anzahl der Eigenwerte von C, die in der offenen rechten komplexen Halbebene $\mathbb{C}_+$ liegen, so gilt (cf. Müller [1977])

$$r(C) = \text{Rang}\,(\sigma_M) \tag{5.4}$$

mit $\sigma_M := [M, C^T M, (C^T)^2 M, \ldots, (C^T)^{s-1} M] \in \mathbb{R}^{s \times s^2}$. (5.5)

σ_M wird auch als Steuerbarkeits-Matrix des Systems $[C^T, M]$ bezeichnet (cf. Müller[1977]). Aus (5.4) sowie Satz 2.6 läßt sich für algebraisch stabile RKV sofort folgende Abschätzung herleiten :

$$r(C) \geq \text{Rang}\,(M) = \text{Rang}\,(Q + Q^T) . \tag{5.5}$$

Dabei ist Q die Residuenmatrix der Normalform Y oder S von C aus § 4. Ist insbesondere die Stabilitätsmatrix $M = \underline{0}$, so ist $\sigma_M = \underline{0}_{s \times s^2}$, also $r(C) = 0$.

Satz 5.3

Die Eigenwerte der geshifteten RK-Matrix C eines algebraisch stabilen RKV mit $M=\underline{0}$ sind rein imaginär und haben zugehörige lineare Elementarteiler.

Verfahren mit verschwindender Stabilitätsmatrix M sind zB. die G(s)-Verfahren, welche auf Gauß-QF beruhen (Butcher[1964a],p=2s). Zu beliebiger Ordnung p können RKV ß dieses Typs konstruiert werden und, wie wir noch in § 7 sehen werden, sie besitzen bzgl. den Stabilitätsgebieten S_A und S_{AN} (cf. (1.16),(1.18)) ausgezeichnete Eigenschaften. Aussagen zu Eigenwertverteilungen für A machen hier ($M=\underline{0}$) einen beträchtlichen Mehraufwand notwendig, denn statt σ_M aus (5.5) für das System $[C^T, M]$ muß die Steuerbarkeitsmatrix σ_{M+bb^T} für das System $[A^T, M+bb^T] = [A^T, bb^T]$ betrachtet werden.

Ist $M=BC+C^TB$ mit $B>0$ positiv semidefinit, so gilt (5.3) für die Eigenwerte λ_i von C. Nach Snyders-Zakai[1970] existiert umgekehrt zu gegebenem C ein $P=P^T>0$, sodaß

$$P C + C^T P \geq 0 , \tag{5.6}$$

falls C die Bedingungen (5.3) erfüllt. Allerdings muß P nicht notwendigerweise Diagonal-Gestalt besitzen. Es gilt aber

Lemma 5.4

Unter den Bedingungen (i) und (ii) aus Satz 5.2 existiert eine zu C ähnliche Matrix C^* und eine Diagonalmatrix $P^*>0$, so daß

$$P^*C^* + C^{*T}P^* \geq 0 \quad . \tag{5.7}$$

Aufgrund dieser Aussage läßt sich ein alternativer Beweis der Äquivalenz der Bedingungen aus Lemma 4.10(ii) und Lemma 4.11(ii) führen.

Beweis. Unter den Bedingungen (i) und (ii) aus Satz 5.2 existiert zu C eine reguläre Matrix $D=D^T>0$ mit $DC + C^TD \geq 0$ (cf. Snyders-Zakai[1970]). Da D symmetrisch ist, existiert ferner eine orthogonale Matrix U mit $U^TD\,U = \text{diag}$. Damit ist

$$\begin{aligned} DC + C^TD \geq 0 \quad &<=> \quad U^T(DC + C^TD)U \geq 0 \\ &<=> \quad (U^TDU)(U^TCU) + (U^TCU)^T(U^TDU) \geq 0 \quad . \end{aligned} \tag{5.8}$$

Setzt man $P^* := U^TDU$ und $C^* := U^TCU = U^{-1}CU$, so folgt die Behauptung. □

Wählt man in obigem Beweis speziell $U^T := (D^{1/2})^{-1}$, wobei $D^{1/2}D^{1/2^T}$ die Cholesky-Zerlegung von D ist, so ist zwar U i.A. nicht mehr orthogonal, die Behauptung bleibt jedoch mit $C^* := U^{-1}CU$ weiterhin gültig. Zusätzlich erhält man jedoch $P^* = I$ und damit $C^* + C^{*T} \geq 0$ (cf. (5.7)). Die Eigenwertverteilungen von C und C^* sind identisch, dennoch ist eine Verteilung der Eigenwerte von C (bzw. C^*) wie in (5.3) nur eine notwendige und keine hinreichende Bedingung.
Analoge Aussagen (Satz 5.2, Lemma 5.4) gelten für die Residuenmatrix Q. Gibt man eine Matrix Q mit (beliebiger) Eigenwertverteilung (5.3) vor, so kann durch obige Konstruktion ein RKV angegeben werden, dessen Residuenmatrix Q^* die vorgegebene Eigenwertverteilung besitzt und das algebraisch stabil ($Q^*+Q^{*T}\geq 0$ und positive QF) ist. Somit hat man eine Art Umkehrung von Satz 5.2.

Die $III_A(s)$- und $III_B(s)$-Verfahren (Ehle[1969]), beruhend auf Lobatto-QF (p=2s-2), haben eine Residuenmatrix $Q \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ der Form

$$Q_{III_A} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad Q_{III_B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \alpha & 0 \end{pmatrix} \tag{5.9}$$

mit $\alpha = \alpha(s) > 0$. In beiden Fällen ist $\lambda_1(Q)=0$ ein Eigenwert mit verschwindendem Realteil und nichtlinearem ET, sodaß diese Verfahren

nicht algebraisch stabil sein können (cf. Scherer[1979]). Es ist sogar möglich, eine Verbindung der Eigenwerte der $III_{A,B}(s)$-Verfahren zu denen der G(s)-Verfahren (Butcher[1964a]) herzustellen. Alle drei Verfahrensklassen führen bzgl. der Stabilitätsfunktion W (oder θ) auf diagonale Padé-Approximationen an $\exp z$) (bzw. $z \tanh(1/2z)$).

Lemma 5.5

Für das Spektrum Σ der Matrizen A bzw. C der G(s-1) bzw. $III_A(s)$-, $III_B(s)$-Verfahren gilt

$$\begin{aligned} &(i) \quad \Sigma(A_{III_{A,B}(s)}) = \Sigma(A_{G(s-1)}) \cup \{0\} , \\ &(ii) \quad \Sigma(C_{III_{A,B}(s)}) = \Sigma(C_{G(s-1)}) \cup \{0\} . \end{aligned} \tag{5.10}$$

Beweis. Alle drei betrachteten Verfahrensklassen beruhen auf QF [c,b] mit positiven Gewichten und paarweise verschiedenen Stützstellen. Die G(s-1)-Verfahren besitzen aufgrund ihrer maximalen Ordnung 2s-2 eine tridiagonale Normalform $Y_{G(s-1)}$ mit $\xi_i=(2(4i^2-1))^{-1/2}$ (i=1,..,s-1) in den Nebendiagonalen. Wegen (5.9) haben die zu den $III_A(s)$-$III_B(s)$-Verfahren gehörenden Normalformen die Gestalt

$$Y_{III_A(s)} = \left(\begin{array}{c|c} Y_{G(s-1)} & \begin{matrix}0\\ \vdots \\ \alpha\end{matrix} \\ \hline 0 \ldots\ldots 0 & 0 \end{array}\right) \quad \text{bzw.} \quad Y_{III_B(s)} = \left(\begin{array}{c|c} Y_{G(s-1)} & \begin{matrix}0\\ \vdots \\ \beta\end{matrix} \\ \hline 0 \ldots 0\ \alpha & 0 \end{array}\right) .$$

Eine analoge Darstellung gilt für die Normalform X von A, woraus die Behauptung folgt. □

Damit hat die geshiftete RK-Matrix C (und Y) der $III_A(s)$-,$III_B(s)$-Verfahren nur rein imaginäre Eigenwerte, also $r(C_{III_{A,B}(s)}) = 0$. Wegen Rang(M) = 2 ergibt sich ein Widerspruch zu (5.5), wodurch erneut verifiziert werden konnte, daß diese Verfahrens-Klassen nicht algebraisch stabil sind.

Zusammen mit Satz 4.11 (bzw. Theorem 3 aus Anderson[1967]) sind wir nun in der Lage, eine weitere interessante Gegenüberstellung des A- und algebraischen Stabilitätsbegriffes für RKV mit positiven Gewichten zu formulieren.

Korollar 5.6

Sei $\mathcal{B}=[c,A,b]$ ein RKV mit positiven Gewichten und C die geshiftete RK-Matrix $C = A - \frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$. Dann ist

(i) $\mathcal{B}$ genau dann A-stabil, wenn es ein $P>0$ gibt, so daß
$PC + C^TP \geq 0$ und $P\mathbb{1} = b$, und (5.11)

(ii) $\mathcal{B}$ genau dann algebraisch stabil, wenn es ein $P>0$ gibt, so daß $PC + C^TP \geq 0$, $P\mathbb{1} = b$ und P hat Diagonalgestalt.

Die Bedingung $P\mathbb{1} = b$ entspricht der zweiten Gleichung von (4.4)' (Satz 4.11) für die hier betrachtete Darstellung der modifizierten Stabilitätsfunktion $\theta(\lambda) = b^T(C + \lambda I)^{-1}\mathbb{1}$.
Die zusätzliche Bedingung der Diagonalgestalt von P in (ii) für algebraisch stabile Verfahren fordert weitere (Struktur-) Annahmen an die geshiftete RK-Matrix C, die allerdings aufgrund von Lemma 5.4 die Eigenwertverteilung von C invariant lassen (Trägheit). Die Ergebnisse lassen sich völlig analog auf die minimale Normalform Y_1 von C (cf. Satz 4.2) oder auf die Residuenmatrix $\hat{C}$ in Y_1 übertragen, da die Gewichte positiv sind und somit eine orthogonale W-Transformation (cf. § 2) durchführbar ist.

SINGLY-Verfahren.

Butchers Transformation zur effizienten Implementierung von impliziten RKV (Butcher[1976],[1981]) gab den Anstoß zur Entwicklung von Verfahren, deren RK-Matrix A nur einen s-fachen reellen Eigenwert γ besitzt, sogenannte SINGLY-RKV oder auch SIPK-Verfahren (Burrage[1979]). Haben diese (identischen) Eigenwerte allerdings den Defekt größer als eins (nichtlineare Elementarteiler(ET)), so stellt sich wiederum erhöhter Rechenaufwand einerseits bei der Durchführung des Verfahrens (Implementierung) und andererseits bei der vorbereitenden Transformation (Unstetigkeiten=Fehlerquellen) ein.
Wir werden im folgenden sehen, daß SINGLY's mit akzeptablem Genauigkeitsgrad (Konsistenzordnung p=s, generell gilt $p \le s+1$, Nørsett[1975]) s-fache reelle Eigenwerte γ mit maximalem Defekt haben. Abschließend wird die Möglichkeit einer absoluten Ordnungsschranke für algebraisch stabile SINGLY's diskutiert.
Im folgenden bezeichnen für ein SINGLY-RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$

γ - s-fachen reellen Eigenwert von A ;

$J = \gamma I + \varepsilon$ - Jordansche Normalform von A, wobei $\varepsilon=(\varepsilon_{ij})_{i,j=1}^{s}$ mit $\varepsilon_{i+1,i} \in \{0,1\}(i=1,..,s-1)$ und $\varepsilon_{ij}=0$ sonst ;

T - reguläre Transformationsmatrix mit $T^{-1}AT = J$.

Lemma 5.7

Für ein SINGLY-RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$ hat die Stabilitätsfunktion $W = N/D$ die Darstellung

$$W(z) = \frac{\sum_{\mu=0}^{s} \left[\sum_{\nu=\mu}^{s} \binom{\nu}{\nu-\mu} \alpha_{s-\nu} (-\gamma)^{\nu-\mu} \right] z^{s-\mu}}{\sum_{\mu=0}^{s} \left[\binom{s}{\mu} (-\gamma)^{s-\mu} \right] z^{s-\mu}} \quad , \tag{5.13}$$

wobei $\alpha_\nu := v^T \varepsilon^{\nu-1} u := b^T T \varepsilon^{\nu-1} T^{-1} \mathbb{1}$, $\nu=0,\ldots,s$; $\alpha_0 := \alpha_1 := 1$. (5.14)

Beweis. Mit $T^{-1}AT = J = \gamma I + \varepsilon$ erhält man

$$W(z) = 1 + z b^T (I - zA)^{-1} \mathbb{1} = 1 + z b^T T (I - zJ)^{-1} T^{-1} \mathbb{1}$$

$$= 1 + \delta v^T (I - \delta\varepsilon)^{-1} u \quad \text{mit } \delta := \delta(z) := z/(1-\gamma z).$$

ε ist nilpotent mit Nilpotenzgrad s ($\varepsilon^\mu = 0$ für alle $\mu \ge s$), also ist

$$W(z) = 1 + \delta v^T(\sum_{\nu=0}^{s-1} \varepsilon^\nu \delta^\nu)u = \sum_{\nu=0}^{s} (v^T \varepsilon^{\nu-1} u)\delta^\nu = \sum_{\nu=0}^{s} \alpha_\nu (\frac{z}{1-\gamma z})^\nu$$

$$= (\sum_{\nu=0}^{s} \alpha_\nu (1-\gamma z)^{s-\nu} z^\nu)/(1-\gamma z)^s = N(z)/D(z) .$$

Wegen $(1-\gamma z)^\kappa = \sum_{\mu=0}^{\kappa} \binom{\kappa}{\mu} (-\gamma)^{\kappa-\mu} z^{\kappa-\mu}$ $(\kappa \in N_0)$ folgt die Behauptung. □

Rationale Approximationen an exp(z) der Form (5.13) haben die Ordnung $p \leq s+1$ und für $s \geq 6$ sogar $p \leq s$ (Nørsett[1975]).

Korollar 5.8

Für ein SINGLY-RKV der Ordnung $p \geq 3$ existiert mindestens ein nichtlinearer Elementarteiler.

Beweis. Zu zeigen ist, daß mindestens ein $\varepsilon_{ii+1} \neq 0$ existiert. Angenommen, ε hat nur verschwindende Elemente ($\varepsilon = 0$). Dann folgt wegen $\alpha_\nu = 0$ $(\nu \geq 2)$ aus (5.13)

$$W(z) = 1 + \delta(z) = 1 + z/(1-\gamma z) = (1 + (1-\gamma)z)/(1-\gamma z) \in \mathcal{R}_{1,1}.$$

Damit muß die Ordnung p des SINGLY-RKV kleiner als 3 sein, was ein Widerspruch zur Voraussetzung ist. □

Die Ordnung p=3 ist mit einem 2-stufigen SINGLY-Verfahren zu erreichen. Also muß γ ein Eigenwert mit maximalem Defekt sein. Diese Aussage kann verallgemeinert werden.

Satz 5.9

Für ein s-stufiges SINGLY-RKV ß sei W die Stabilitätsfunktion in irreduzibler Darstellung. Ist $W \in \mathcal{R}_{l,l}$ $(1 \leq l \leq s)$, so hat der s-fache reelle Eigenwert γ von A mindestens den Defekt l-1.

Ist $W \in \mathcal{R}_{l,l}$ für ein $l \in \{1,\ldots,s\}$, so existiert mindestens ein Jordan-Kästchen J_l der Dimension l in der Jordanschen Normalform J von A. Ein für die Praxis wichtiger Fall ist l:=s. Ein SINGLY-RKV mit irreduzibler Stabilitätsfunktion $W \in \mathcal{R}_{s,s}$ der Form $W(z) = N(z)/(1-\gamma z)^s$ wird von einer RK-Matrix A erzeugt, welche ähnlich zu der Jordanschen Normalform

$$J = \begin{pmatrix} \gamma & & 0 \\ 1 & \ddots & \\ 0 & 1 & \gamma \end{pmatrix}$$

ist.

Beweis. Wir zeigen, daß unter den Voraussetzungen des Satzes in

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & & \\ \varepsilon_1 & \ddots & 0 \\ 0 & \varepsilon_{s-1} & 0 \end{pmatrix} \qquad (\varepsilon_i \in \{0,1\}, i=1,\ldots,s) \tag{5.15}$$

der Jordanschen Normalform $J=\gamma I+\varepsilon$ von A eine Kette $\{\varepsilon_\nu,\varepsilon_{\nu+1},\ldots,\varepsilon_{\nu+\cdot}\}$ $=: m(\varepsilon)$ der Mindestlänge l-1 von nichtverschwindenden ε_i $(i=0,..,\cdot)$ existiert. Die Anzahl der Elemente der Kette $m(\varepsilon)$ und damit die Mindestlänge soll mit $\#m(\varepsilon)$ bezeichnet werden. Für ε aus (5.15) sind für alle $\mu=1,\ldots,s-1$ folgende Aussagen äquivalent

(i) $\varepsilon^\mu \neq \underline{0}$,

(ii) es existiert eine Kette $m(\varepsilon)$ mit $\#m(\varepsilon) \geq \mu$, (5.16)

(iii) es existiert ein ET vom Mindestgrad μ .

Ferner ist $\#m(\varepsilon)=\mu$ genau dann, wenn $\varepsilon^\mu \neq \underline{0}$ und $\varepsilon^{\mu+1}=\underline{0}$ $(\mu\in\{1,\ldots,s-1\})$. Für die Äquivalenz von (i) und (ii) soll die Beweisidee für den Fall $s=4$ veranschaulicht werden. Es ist

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \times & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 \\ & \Delta & & 0 \\ & & & 0 \end{array}\right) \neq \underline{0} \quad \text{genau dann, wenn}$$

$$\Delta = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \\ & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \\ 1 & \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \\ 0 & \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \\ 1 & \end{pmatrix};$$

$$\varepsilon^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \\ \times & 0 & 0 & \\ 0 & \times & 0 & \end{pmatrix} \neq \underline{0} \quad \text{genau dann, wenn } \Delta = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & \\ 1 & \end{pmatrix};$$

$\varepsilon^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \times \end{pmatrix} \neq \underline{0}$ genau dann wenn $\Delta = \begin{pmatrix} 1 & \\ 1 & \end{pmatrix}$; $\varepsilon^4 = \underline{0}$.

Hat die Stabilitätsfunktion des vorgelegten SINGLY-RKV die irreduzible Darstellung W mit $W\in \mathcal{R}_{l,l}$ $(1\leq l\leq s)$, so läßt sich W darstellen als (cf. Beweis von Lemma 5.7)

$$W(z) = \sum_{\nu=0}^{l} \alpha_\nu \left(\frac{z}{1-\gamma z}\right)^\nu , \quad \alpha_l \neq 0 \text{ und } z \neq 1/\gamma .$$

Angenommen, es existiert keine Kette $m(\varepsilon)$ mit $\#m(\varepsilon)\geq l-1$. Nach (5.16) ist $\#m(\varepsilon)<l-1$ äquivalent zu $\varepsilon^{l-1}=\underline{0}$. Damit ist insbesondere

$$\alpha_l = v^T \varepsilon^{l-1} u = 0 ,$$

was ein Widerspruch zur Annahme $\alpha_l \neq 0$ ist. □

Bzgl. SINGLY-RKV mit einem akzeptablem Genauigkeitsgrad (p=s) muß also im Hinblick auf Butchers Transformation mit erhöhtem Aufwand

gerechnet werden; für A-stabile SINGLY's mit $p \geq s \geq 6$ ist sogar mit maximalem Aufwand zu rechnen, da es für $s \geq 6$ keine A-stabilen Approximationen an $\exp(z)$ der Form $N(z)/(1-\gamma z)^s$ der (Approx.-) Ordnung $p \geq s$ mehr gibt (Wanner-Hairer-Nørsett[1978]).

In Burrage[1978] wurden A-stabile SINGLY's mit $s \leq p \leq s+1$ für $s \leq 6$ hergeleitet. Weiter existieren SINGLY-RKV für $s=5$ und $p=6$, welche sogar algebraisch stabil sind (Hairer-Wanner[1981]), jedoch keine für $s \geq 6$ und $p=s+1$ sowie $p=s=7$. Eine spezielle Teilklasse der SINGLY-RKV, die sogenannten DIRK-Verfahren ('diagonally implicit Runge-Kutta' ; SINGLY's mit semi-impliziter Verfahrensmatrix A), sind sogar nur für $p \leq 4$ algebraisch stabil (Hairer[1980]). Es taucht somit die Frage auf, ob algebraisch stabile- oder sogar A-stabile SINGLY-RKV eine absolute Ordnungsschranke besitzen. Eine endgültige Antwort auf diese Frage kann zwar nicht gegeben werden, doch sind im abschließendem Lemma 5.10 einige notwendige Bedingungen algebraisch (bzw. A-) stabiler SINGLY's zusammengestellt, die zeigen (cf.(5.20)), daß mit zunehmender Stufenzahl s (=p) der Bereich für γ sehr stark eingeschränkt wird.

Lemma 5.10

Algebraisch stabile SINGLY-RKV mit dem s-fachen reellen Eigenwert γ von A haben folgende Eigenschaften : $(k=[(p-1)/2])$

(a) $\gamma \geq 1/2s > 0$;

(b) $2(2k+1)|Q| + |\hat{Q}| = \frac{(2k+2)!}{(k+1)!}\gamma^s$; 'Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$' genau dann, wenn $|Q| = (2k)!/(2k!)\,\gamma^s$; (5.17)

(c) $\gamma \geq \frac{1}{2}\max_{i=1}^{s}\{(w_1^i)^2/\|w^i\|_2^2\}$, mit $w^i := W^T B x^i$, x^i sind die (5.18)
Hauptvektoren von A zu $\lambda_i(A)=\gamma$ $(i=1,\ldots,s)$;

(d) $\gamma \geq -\lambda_{min}(V+V^T)$ mit $V = V(B) := \hat{B}^{1/2}\varepsilon\,\hat{B}^{-1/2}$, $\hat{B} := X^T B X$, (5.19)
$X^{-1}AX = J = \gamma I + \varepsilon$;

(e) Das lineare Gleichungssystem
$$\sum_{\mu=0}^{\min\{k,q\}} \binom{k}{\mu}(k+\mu)!\{f_{q-\mu} + \delta_{\mu k} g_{q-\mu}\} = (2k)!\binom{s}{q}\gamma^{s-q}, \quad q=0,..,s-1, \tag{5.20}$$
mit $\delta_{\mu k} := \frac{k-\mu}{2(2k+1)(k+\mu)}$, $\mu=0,1,..,k$, $f_{s-k} := g_{s-k-1} := 1$, $g_{s-k} := 0$,
hat mindestens eine positive Lösung, dh. es existieren

$f_o,\dots,f_{s-k-1},g_o,\dots,g_{s-k-2} \geq 0$ für ein $\gamma>0$.
Insbesondere ist für ungerades $p=s$ $\gamma \geq \frac{s+1}{2s(s-1)}$. (5.21)

Die Beweise von (a)-(e) benötigen recht unterschiedliche Techniken, sodaß aus Platzgründen hierfür auf den Anhang A5 verwiesen wird. □

Das Gleichungs-System (5.20) ergibt sich alleine aus der Tatsache, daß W für SINGLY-RKV von der speziellen Gestalt $W(z)=N(z)/(1-\gamma z)^s$ (cf. (5.13)) ist. Für p=s ist (5.20) eindeutig lösbar, wenn $f_{s-k-1}=g_{s-k-2}$ für gerades p(=s) gesetzt wird. Fordert man von W ferner A-Verträglichkeit, so müssen die Koeffizienten f_i,g_i weiteren Bedingungen genügen (cf. § 3).

Beispiel.

Für p=s=5, k=2 ergeben sich aus (5.20) die 5 Gleichungen (q=0,..,4) :

$$\gamma^5 = \frac{1}{120}(10f_o + g_o)$$
$$5\gamma^4 = \frac{1}{120}(10f_1 + 60f_o + g_1 + 2g_o)$$
$$10\gamma^3 = \frac{1}{120}(10f_2 + 60f_1 + 120f_o + 2g_1 + 1)$$
$$10\gamma^2 = \frac{1}{10}(5f_2 + 10f_1 + 1)$$
$$5\gamma = \frac{1}{2}(2f_2 + 1) \quad .$$

Die Lösungen erhält man in Abhängigkeit von γ zu

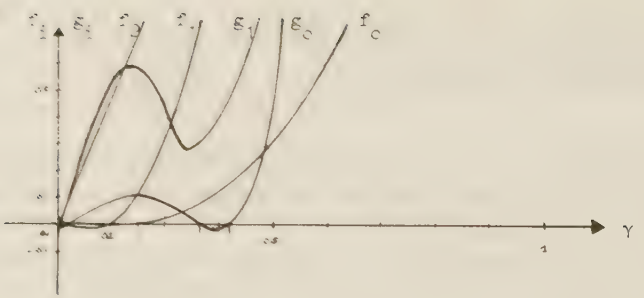
$$f_2 = 5\gamma - \frac{1}{2}$$
$$f_1 = 10\gamma^2 - \frac{5}{2}\gamma + \frac{3}{20} = (5\gamma - \frac{1}{2})(2\gamma - \frac{3}{20})$$
$$f_o = 12\gamma^5 - 30\gamma^4 + 30\gamma^3 - 10\gamma^2 + \frac{5}{4}\gamma - \frac{1}{20}$$
$$g_1 = -720\gamma^5 + 1800\gamma^4 - 1200\gamma^3 + 300\gamma^2 - 25\gamma + \frac{1}{2}$$
$$g_o = 300\gamma^4 - 300\gamma^3 + 100\gamma^2 - \frac{25}{2}\gamma + \frac{1}{2} \quad .$$

Aus der Skizze auf der folgenden Seite entnimmt man die möglichen Bereiche für $0.1 \leq \gamma \leq 1$ zu

$$[0.2465,0.3618] \cup [0.42078,1] \quad . \tag{5.22}$$

Es ist weiter möglich, das Gleichungs-System (5.20) zu reduzieren und zu ordnen, sodaß als Grund-System im wesentlichen eine (s-2)×(s-2)-Matrix vom (s-k-2)-Band-Typ zu invertieren bleibt.

Skizze.



Für $6 \leq s \leq p \leq 9$ ergeben sich folgende Intervalle $I_{s,p} \subseteq [0,1]$ derart, daß (5.20) für SINGLY-RKV eine positive Lösung besitzt.

Tabelle.

s	p	$I_{s,p}$
5	5	[0.2465,0.3618] ∪ [0.42078,1]
5	6	0.4732683913
6	6	[0.126510,0.181912]∪[0.284065,1]
6	7	0.5566999424
7	7	[0.192731,0.21674]∪[0.317113,0.640443]
7	8	0.6406670123
8	8	[.139299,.145017]∪[.217005,.264716]∪[.344935,.723 955]
8	9	0.51594044 , 0.68603821
9	9	ϕ

§ 6 Symmetrie-Betrachtungen

In der Menge $\mathbb{B}_s$ der s-stufigen RKV ß ist es möglich Klassen anzugeben, die einen vorgegebenen (linearen) Stabilitätsbereich $S_A \subseteq \mathbb{C}$ (cf.(1.16)) besitzen. Eine derartige Klasse von RKV wurde von Stetter[1973](Def.3.2.4) mittels eines (linearen) Symmetriebegriffes charakterisiert. Symmetrische Verfahren haben die Eigenschaft, daß S_A genau die linke komplexe Halbebene umfaßt, dh. daß bzgl. der (linearen) Testgleichung $y'=qy$ keine unangenehmen Überdämpfungen der numerischen Werte y_n ($n\geq 1$) nahe der imaginären Achse ($q \in \mathbb{C}_+$) auftritt.

Wie wir in den vorangegangenen Paragraphen bereits gesehen haben, genügt es für die numerische Behandlung von allgemeinen nichtlinearen AWA'n nicht, nur die lineare Testgleichung (A-Stabilität) zu betrachten. Aus diesem Grunde soll obiger klassische Symmetrie-Begriff für RKV hinsichtlich der neuen nichtlinearen Stabilitätsbegriffen (AN-, algebraische Stabilität) angepaßt werden. Es zeigt sich, daß einerseits mittels der geshifteten RK-Matrix C aus (1.6) und andererseits aufgrund der in (1.23) eingeführten, zu ß transponierten bzw. gespiegelten RKV $ß^T$ bzw. $ß^*$ die unten definierten, nichtlinear- bzw. internsymmetrischen Verfahren einfach zu charakterisieren sind (Satz 6.5, Satz 6.8).

Ferner lassen sich über die Residuenmatrix Q der Normalform Y eines RKV's interessante Zusammenhänge zwischen den behandelten Symmetrien herleiten.

Die RKV ß, $ß^T$ sowie $ß^*$ sollen im weiteren in geordneter Weise vorliegen ($c_i \leq c_j$ für $1 \leq i < j \leq s$). Ferner werden zwei RKV $ß^1$ und $ß^2$ als gleich bezeichnet ($ß^1 = ß^2$), wenn ihre erzeugenden Matrizen A^i und ihre QF'n $[c^i, b^i]$ (i=1,2) identisch sind. Gleiche RKV haben dieselbe Stabilitätsfunktion W (bzw. Ψ oder Θ), jedoch gilt nicht die Umkehrung, wie die Klassen G(s-1) und $III_A(s)$, $III_B(s)$ (Butcher [1964a], Ehle[1969]) zeigen.

Wesentlich für das Weitere sind folgende Aussagen (Scherer-Türke [1983]).

Lemma 6.1

Für die zu dem RKV $\beta=[c,A,b]$ gespiegelten bzw. transponierten RKV $\beta^*=[c^*,A^*,b^*]$ bzw. $\beta^T=[c^T,A^T,b^T]$ gilt

$$\text{(i)}\quad c^* = -PcP\ ;\ c^T = PB^{-1}c^TBP\ ; \tag{6.1}$$

$$\text{(ii)}\quad \Psi^*(z) = -\Psi(-z)\ ;\ \Psi^T(z) = \Psi(z)\ ; \tag{6.2}$$

$$\text{(iii)}\quad \tilde\Psi^*(Z) = -\tilde\Psi(-PZP)\ ;\ \tilde\Psi^T(Z) = \tilde\Psi(PZP)\ ; \tag{6.3}$$

$$\text{(iv)}\quad M^* = -PMP\ ;\ M^T = PMP\ . \tag{6.4}$$

Dabei ist C die geshiftete RK-Matrix (1.6), Ψ bzw. $\tilde\Psi$ die zu W bzw. $\tilde W$ gehörenden modifizierten Stabilitätsfunktionen, M die Stabilitätsmatrix aus (1.12) und P die Permutationsmatrix $P = \begin{pmatrix} & & 1\\ & \iddots & \\ 1 & & \end{pmatrix}$.

Lineare Symmetrie.

Ein RKV $\beta=[c,A,b]$ ist nach Stetter[1973] genau dann symmetrisch ('linear symmetrisch'), wenn $\beta=\beta^*$, also β ein Fixpunkt bzgl. der Spiegelungsabbildung Φ (cf. (1.20)) darstellt. Wegen $c=c^*=1-Pc$ muß einem linear symmetrischen RKV eine symmetrische QF $[c,b]$ zugrunde liegen. Aufgrund von (6.2) folgt für die lineare Testgleichung ($y'=qy$) $S_A=\bar{\mathbb{C}}_-$. Es existieren allerdings RKV (z.B. Trapez-Regel), die zwar ein symmetrisches Stabilitätsgebiet S_A besitzen, das (nichtlineare) Stabilitätsgebiet S_{AN} aber nicht mehr symmetrisch ist. Damit ist auch aus geometrischen Gründen einleuchtend, hier von linearer Symmetrie zu sprechen.

Satz 6.2

Ein RKV $\beta=[c,A,b]$ mit einer symmetrischen QF $[c,b]$ ist genau dann linear symmetrisch ($\beta=\beta^*$), wenn für die geshiftete RK-Matrix C gilt

$$PC + CP = \underline{0}\ . \tag{6.5}$$

Beweis. Für ein RKV $\beta=[c,A,b]$ ist $\beta=\beta^*$ unter den gegebenen Voraussetzungen äquivalent zu $A = P(1b^T-A)P$ und $b = Pb$. Letztere Gleichung folgt aus $c = 1-Pc$. Mit $C=A-\frac{1}{2}1b^T$ ist $A = P(1b^T-A)P$ äquivalent zu der behaupteten Gleichung (6.5). □

Die Matrizengleichung (6.5) ist äquivalent zu $PCP = -C$ bzw. zu

$$c_{ij} = -c_{s-i+1,s-j+1} \quad (i,j=1,\ldots,s) \; .$$

Man erkennt somit linear symmetrische RKV durchaus schon an dem Aufbau der geshifteten RK-Matrix $C=A-\frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$. Besitzt die symmetrische QF $[c,b]$ ferner paarweise verschiedene Stützstellen und positive Gewichte (positive QF) und hat C bzgl. der W-Transformation eine Normalform $Y=W^TBCW$ mit $k=[(p-1)/2]$ der Gestalt (cf. §§ 2,3)

$$Y = \left(\begin{array}{cccc|c} 0 & -\xi_1 & & & \\ \xi_1 & \ddots & \ddots & & 0 \\ & \ddots & 0 & -\xi_k & \\ \hline & & \xi_k & & \\ & 0 & & & Q \end{array}\right) k \;, \qquad (6.6)$$

so kann die lineare Symmetrie des RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$, welches aus Y im Sinne von Satz 2.6 erzeugt bzw. charakterisiert wird, durch gewisse Bedingungen an die Residuenmatrix $Q\in\mathbb{R}^{(s-k)\times(s-k)}$ beschrieben werden.

<u>Satz 6.3</u>

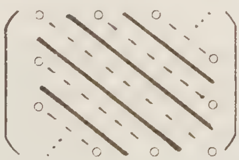
Ein RKV $\mathcal{B}$ mit positiver symmetrischer QF $[c,b]$und einer Normalform Y aus (6.6) ist genau dann linear symmetrisch ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^*$), wenn für die Residuenmatrix Q gilt

$$Q + FQF = \underline{0} \qquad (6.7)$$

mit $F := \mathrm{diag}(+1,-1,+1,\ldots,\pm1)$.

<u>Beweis</u>. Unter den gegebenen Voraussetzungen gilt mit $W:=(p_{j-1}(c_i))$ $(i,j=1,\ldots,s)$, wobei $p_j(t)$ die auf $[0,1]$ orthonormierten Legendre-Polynome $(j\geq0)$ sind : $\mathcal{B} = \mathcal{B}^* \iff W^TB(C + (PCP))W = \underline{0}$. Da $BP=PB$ und $W^TP = FW^T$ folgt die Behauptung. □

Die in Satz 6.3 charakterisierten linear symmetrischen RKV haben damit eine Residuenmatrix der Form

$Q =$  . (6.8)

Mittels der Normalform Y aus (6.6) mit Q aus (6.8) ist es nun möglich, linear symmetrische RKV der Ordnung $p\geq2k+1$ zu konstruieren, falls

auch die gewählte QF [c,b] symmetrisch und positiv ist, sowie die Mindestordnung p besitzt (cf. Satz 2.6). Die Residuenmatrizen der $III_A(s)$- bzw. $III_B(s)$-Verfahren (Ehle[1969]), beruhend auf der positiven und symmetrischen Lobatto-QF, wurden bereits in (5.9) angegeben. Man erkennt, daß sie die Gestalt (6.8) besitzen, diese Verfahren also linear symmetrisch sind (W ist diagonale Padé-Approximation an exp(z)).

Durchaus nicht ausgeschlossen ist die Existenz weiterer, durch die Normalform (6.6) und Q aus (6.8) nicht erzeugter linear symmetrischer Verfahren mit positiver, symmetrischer QF der Ordnung p. Fordert man allerdings zusätzlich die Eigenschaft der algebraischen Stabilität, so erhält man aufgrund von Satz 2.6 eine vollständige Charakterisierung.

Korollar 6.4

Ist eine positive symmetrische QF [c,b] der Ordnung p gegeben, so sind alle algebraisch stabilen und linear symmetrischen RKV $\mathcal{B}=[c,A,b]$ der Ordnung $p\geq 2k+1$ gegeben durch $A = WYW^TB + \frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$ mit der Normalform Y aus (6.6) und $Q\in\mathbb{R}^{(s-k)\times(s-k)}$ mit

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & q_{12} & 0 & q_{14} & \cdots \\ -q_{12} & 0 & & & q_{..} \\ 0 & & & & 0 \\ -q_{14} & & & 0 & q_{..} \\ \vdots & & -q_{..} & 0 & -q_{..} \quad 0 \end{pmatrix} . \tag{6.9}$$

Insbesondere ist hier die Stabilitätsmatrix $M = \underline{0}$.

RK-Verfahren mit verschwindender Stabilitätsmatrix $M=BC+C^TB$ werden uns auch im nächsten Abschnitt beschäftigen (cf. auch § 7).

Nichtlineare Symmetrie.

Eine weitere interessante Klasse hinsichtlich Symmetrie-Eigenschaften von RKV bilden die Verfahren, welche Fixpunkte bzgl. Komposition der Transpositions- und Spiegelungsabbildung (cf.(1.22)) darstellen. Aufgrund der involutorischen Eigenschaften von Ψ und Φ ist dies gleichbedeutend mit der Forderung $\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$; diese Eigenschaft eines RKV $\mathcal{B}$ soll im folgenden mit 'nichtlinearer Symmetrie' bezeichnet werden.

Man beachte hier, daß die QF'n beider Verfahren $\mathcal{B}^*$ und $\mathcal{B}^T$ identisch sind ($[c,b]^T = [c,b]^* = [\mathbf{1}-Pc,Pb]$).

Satz 6.5

(a) Ein RKV $\mathcal{B}$ mit nichtverschwindenden Gewichten ist genau dann nichtlinear symmetrisch ($\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$), wenn $M = \underline{0}$.

(b) Ein RKV $\mathcal{B}$ mit positiven Gewichten ist genau dann nichtlinear symmetrisch ($\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$), wenn die Normalform Y bzgl. C durch (6.6) mit $Q + Q^T = \underline{0}$ gegeben ist.

Beweis. Da die zugrunde liegenden QF'n der RKV $\mathcal{B}^*$ und $\mathcal{B}^T$ identisch sind, bleibt noch $A^*=A^T$ zu zeigen. Es ist $A^* = P(\mathbb{1}b^T-A)P = PB^{-1}A^TBP = A^T$ äquivalent zu $A + B^{-1}A^TB - \mathbb{1}b^T = \underline{0}$. Da B regulär, ergibt sich die äquivalente Bedingung $M = BA+A^TB-bb^T = \underline{0}$.
Ist ferner $B=\mathrm{diag}(b_1,\ldots,b_s)>0$, so sind nach Satz 2.6 alle algebraisch stabilen RKV durch Y aus (6.6) mit $Q+Q^T\geq 0$ gegeben. Da $M=\underline{0}$ genau dann, wenn $Q+Q^T=\underline{0}$, folgt die Behauptung aus Teil (a). □

Ein alternativer Beweis der Aussage (b) folgt mittels Lemma 1.7. Da $\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$, muß aufgrund der positiven Gewichte von $\mathcal{B}$ C(k) und D(k) für $k=[(p-1)/2]$ erfüllt sein, woraus sich die Normalform Y von C der Gestalt (6.6) ergibt.
Eine Begründung, warum hier von 'nichtlinearer Symmetrie' gesprochen werden kann, gibt die Veranschaulichung des (nichtlinearen) Stabilitätsgebietes S_{AN} eines RKV mit $M=\underline{0}$.

Lemma 6.6

Nichtlinear symmetrische RKV $\mathcal{B}$ ($\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$) mit $b_i\neq 0$ (i=1,...,s) erfüllen

$$|\tilde{W}(i\Omega)| = 1 \quad , \quad \mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}(i\Omega) = 0 \tag{6.10}$$

für alle $\Omega := \mathrm{diag}(y_1,\ldots,y_s)$ und $y_i\in\mathbb{R}$ (i=1,..,s) .

Beweis. Gleiche RKV haben identische Stabilitätsfunktionen, sodaß $\tilde{W}^*=\tilde{W}^T$ bzw. $\tilde{\Psi}^* = \tilde{\Psi}^T$ gilt. Aufgrund der reellen Koeffizienten von $\tilde{\Psi}$ ergibt sich für $Z:=i\Omega = i\,\mathrm{diag}(y_1,\ldots,y_s)$:

$$\mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}^T(\bar{Z}) = \mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}(-i\Omega) = \mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}(i\Omega) = -\mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}(-i\Omega) = \mathrm{Re}\ \tilde{\Psi}^*(Z) .$$

Lemma 6.1 (iii) liefert schließlich die Behauptung für $\tilde{\Psi}$. Analog zeigt man die Eigenschaft für $\tilde{W}$. □

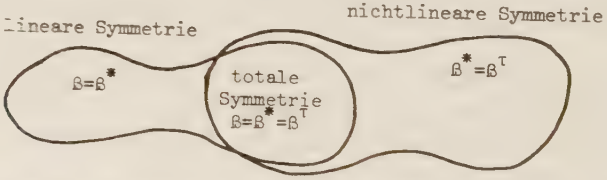
Algebraisch stabile, linear symmetrische RKV (Korollar 6.4) sind damit insbesondere nichtlinear symmetrisch. Daß auch eine Art Umkehrung gültig ist, zeigt

Korollar 6.7

Unter den linear symmetrischen RKV ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^*$) sind die algebraisch stabilen genau die nichtlinear symmetrischen Verfahren mit positiven Gewichten. Insbesondere haben diese Verfahren die Eigenschaften $\mathcal{B} = \mathcal{B}^* = \mathcal{B}^T$ und $M = \underline{0}$.

RKV mit $\mathcal{B}=\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$ werden als 'total symmetrisch' bezeichnet. G(s)- bzw. $III_E(s)$-Verfahren (Butcher[1964a],Nørsett-Wanner[1981]) sind total symmetrische RKV.

Beweis. Die Behauptung folgt sofort durch Vergleich der zulässigen Residuenmatrizen Q der Normalform Y von C aus Satz 6.3, Korollar 6.4 und Satz 6.5. Zusammen ergibt sich die Eigenschaft $\mathcal{B}=\mathcal{B}^*=\mathcal{B}^T$. □



Weitere Eigenschaften von nichtlinear symmetrischen RKV werden im nächsten Paragraphen aufgeführt. Ferner werden dort Verfahrens-Scharen mit $M=\underline{0}$ diverser Stufenzahlen s und Ordnungen p mit Parametern angegeben, welche nach geeignet erscheinenden Kriterien gewählt werden können.

Interne Symmetrie.

In Ergänzung der beiden vorangehenden Abschnitte betrachten wir hier RKV $\mathcal{B}$, welche Fixpunkte bzgl. der Transpositions-Abbildung Ψ sind ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^T$). Hierbei, wie im Falle der linearen Symmetrie ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^*$), beachte man wieder die geforderte Symmetrie der zugrunde liegenden QF [c,b]. Hinsichtlich den Eigenschaften der Stabilitätsfunktionen bzw. Stabilitätsmatrizen (Lemma 6.1) $\Psi,\tilde{\Psi}$ bzw. M bei Transposition eines RKV $\mathcal{B}$, sowie der Vertauschung der Bedingungs-Gleichungen C(.) und

D(.), kann für Verfahren mit $\mathcal{B}=\mathcal{B}^T$ von einer 'internen Symmetrie' gesprochen werden.

Satz 6.8

(a) Ein RKV $\mathcal{B}$ mit einer symmetrischen QF [c,b] und nichtverschwindenden Gewichten ist genau dann intern symmetrisch ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^T$), wenn für die geshiftete RK-Matrix C gilt

$$P\,(BC) - (BC)^T P = \underline{0} \quad . \tag{6.11}$$

(b) Ein RKV $\mathcal{B}$ mit einer positiven symmetrischen QF [c,b] ist genau dann intern symmetrisch ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^T$), wenn $\mathcal{B}$ eine Normalform Y aus (6.6) besitzt, wobei

$$Q - F\,Q^T F = \underline{0} \tag{6.12}$$

mit $F := \mathrm{diag}(+1,-1,+1,\ldots,\pm 1)$.

Beweis. (a) Die RKV $\mathcal{B}$ und $\mathcal{B}^T$ sind genau dann gleich, wenn $A = PB^{-1}A^TBP$. Subtrahiert man auf beiden Seiten $\mathbb{1}b^T/2$, so ergibt sich die äquivalente Gleichung $C = PB^{-1}C^TBP$. Wegen $PB=BP$ erhält man die behauptete Identität (6.11).
(b) Da $\mathcal{B}=\mathcal{B}^T$ und $B>0$, erfüllt $\mathcal{B}$ $C(k)$ und $D(k)$ mit $k=[(p-1)/2]$. Damit hat die Normalform Y von C die Gestalt (6.6). Die Bedingung (6.12) an die Residuenmatrix Q ergibt sich analog dem Beweis von Satz 6.3. □

Im Gegensatz zu linear symmetrischen RKV ($\mathcal{B}=\mathcal{B}^*$, cf. Satz 6.3) ist hier die Normalform Y der Gestalt (6.6) notwendig, falls die QF [c,b] positiv ist. Komponentenweise bedeutet die Bedingung (6.12) für die Residuenmatrix $Q=(q_{ij})_{i,j=1}^{l}$ $(l=s-k)$:

$$q_{ij} = (-1)^{i+j} q_{ji} \qquad (i,j=1,\ldots,l). \tag{6.13}$$

Damit hat Q die Form

$$Q = P + U = \begin{bmatrix} q_{11} & 0 & q_{13} & 0 & \iddots & \\ 0 & & & & & 0 \\ q_{13} & & & & & q_{l1-2} \\ 0 & & & & & 0 \\ & \iddots & & & & \\ & 0 & q_{l-2} & 0 & q_{l1} & \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & q_{12} & 0 & \iddots & \\ -q_{12} & 0 & & & 0 \\ 0 & & & & q_{l-1l} \\ & \iddots & & & \\ & & 0 & -q_{l-1l} & 0 \end{bmatrix} . \tag{6.14}$$

Zusammenfassung.

Intern symmetrisch sind insbesondere die total symmetrischen RKV (cf. Korollar 6.7). Wegen $Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \pm\gamma \end{pmatrix}$ mit $\gamma=\gamma(s)>0$ sind die auf Lobatto-QF beruhenden III(s)- bzw. $III_C(s)$-Verfahren von Butcher [1964b] bzw. Chipman[1971] intern symmetrisch. Weitere Folgerungen und Zusammenhänge sind in folgendem Korollar zusammengestellt.

Korollar 6.9

Für ein RKV β mit einer positiven symmetrischen QF sind folgende Aussagen äquivalent

(i) β ist total symmetrisch ($\beta=\beta^*=\beta^T$) ;

(ii) β hat eine Normalform Y aus (6.6) mit $k=[(p-1)/2]$ und $Q := U$, wobei U aus (6.14) ;

(iii) $\beta = \beta^*$ und $M = \underline{0}$;

(iv) $\beta = \beta^T$ und $M = \underline{0}$.

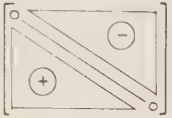
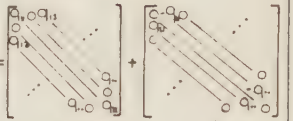
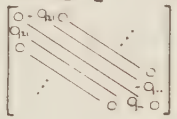
Für total symmetrische RKV ergibt sich die Anzahl der freien Parameter π in Abhängigkeit von $l:=s-k$ zu

$$\pi(l) = \sum_{\mu=0}^{\left[\frac{l-2}{2}\right]} (l - (2\mu+1)) = \begin{cases} (l^2-1)/4 & \text{falls } l \text{ ungerade ,} \\ l^2/4 & \text{falls } l \text{ gerade .} \end{cases} \qquad (6.15)$$

Da Q ferner eine spezielle schiefsymmetrische Matrix ist, sind alle Eigenwerte von Q und von $C = A - \frac{1}{2}\mathbb{1}b^T$ rein imaginär und haben zugehörige lineare Elementarteiler. Wie wir im nächsten Paragraphen noch genauer sehen werden, hat insbesondere diese Verfahrensklasse die Eigenschaft, sehr sensibel auf Dissipativität/Accretivität-Änderungen eines vorgelegten DGL-Systems zu reagieren.

Tabelle.

Tabelle 6.10

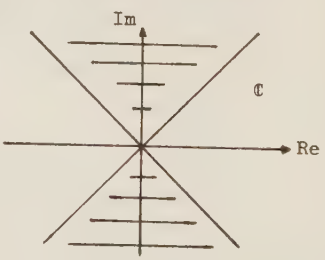
	$\mathcal{B} = \mathcal{B}^*$	$\mathcal{B}^* = \mathcal{B}^\tau$	$\mathcal{B} = \mathcal{B}^\tau$
Symmetrie	lineare	nichtlineare	interne
Fixpunkte bzgl.	Spiegelung	Komposition	Transposition
Quadratur-Formel	symmetrisch	beliebig	symmetrisch
Charakterisierung bei Vorliegen der Normalform (6.6)	$Q =$	$Q =$ 	$Q=P+U=$ 
M = $\underline{0}$, falls	$Q =$	$Q =$ —— " ——	$Q = U =$ 
Beispiele von Verfahrens-Klassen	$G(s)$, $III_A(s)$ $III_B(s)$, $III_E(s)$	$G(s)$ $III_F(s)$	$G(s)$, $III(s)$, $III_C(s)$, $III_{\underline{C}}(s)$, $III_F(s)$, $III_E(s)$

§ 7 Der Grenzfall M = 0

Bereits im vorhergehenden Paragraphen 6 wurde auf eine bestimmte Klasse von RKV hingewiesen, welche Fixpunkte bzgl. der Komposition von Transposition und Spiegelung Ψ bzw. Φ sind ('nichtlinear symmetrische' RKV). Ferner konnte eine bemerkenswert einfache Charakterisierung dieser Verfahrensklasse mittels der Stabilitätsmatrix M (M=0) und damit eine konstruktive Charakterisierung bei vorgegebener positiver QF hergeleitet werden (Satz 6.5).
Im folgenden sollen nun für diese nichtlinear symmetrischen RKV weitere Eigenschaften gezeigt (Lemma 7.1,Korollar 7.2,Satz 7.3) und Verfahrens-Scharen verschiedener Stufenzahlen und Ordnungen angegeben werden.

Weitere Eigenschaften.

Wir betrachten RKV $\beta=[c,A,b]$, deren zugehörige Stabilitätsmatrix $M = BC + C^TB$ (cf.(1.19)) mit $C = A - \frac{1}{2}\mathbb{1}\, b^T$ verschwindende Elemente besitzt. In Lemma 6.6 wurde bereits eine wichtige Eigenschaft von RKV mit M=0 gezeigt. AN-stabile, und im Falle $c_i \neq c_j$ $(i \neq j)$ auch algebraisch stabile Verfahren mit M=0, besitzen genau dann betragsmäßig nicht-steigende Näherungslösungen $\{y_n\}_{n=0}^N$, wenn für alle $i=1(1)s$ $z_i := hq(t_n+c_ih) \in \bar{\mathbb{C}}_-$. Dabei bezeichnet q die komplexwertige Funktion der AN-Testgleichung (cf.(1.10)). Zu jedem $w \notin \bar{\mathbb{C}}_-$ existiert also eine Funktion $q:[0,h] \to \mathbb{C}$, so daß für ein $j \in \{1,\ldots,s\}$ $hq(t_n+c_jh) = w$, die übrigen $hq(t_n+c_ih) \in \bar{\mathbb{C}}_-$ $(i=1(1)s, i \neq j)$ und die Näherungslösung y_{n+1} gegenüber y_n betragsmäßig ansteigt. Diese Eigenschaft zeigt die extrem sensible Reaktion der RKV mit M=0 und positiver QF $[c,b]$ bzgl. Stabilitätsänderungen (dissipativ/accretiv) einer vorgelegten AWA; dissipative Systeme werden numerisch kontraktiv und accretive Systeme numerisch expansiv gelöst, falls die Verfahren hinreichend genau implementiert werden. Dies ist ins-



$G\left[\frac{\partial f}{\partial y}(y(t))\right]$

besondere für die Behandlung von DGL-Systemen von Interesse, deren Eigenwerte (der Jakobimatrix) nahe der imaginären Achse liegen, oder im Verlauf der Rechnung innerhalb einer Bandbreite um die imaginäre Achse schwanken.

Lemma 7.1

Für algebraisch stabile RKV ß mit $M = \underline{0}$ gilt

(i) Der Stabilitätsbereich S_{AN} umfaßt genau $(\bar{\mathbb{C}}_-)^S$;

(ii) $ß^T$ und $ß^*$ sind ebenfalls algebraisch stabil mit $M = \underline{0}$;

(iii) Ist die RK-Matrix A regulär, so kann ß nicht extrem stabil sein.

Beweis. (i) cf. Lemma 6.6. (ii) Die Positivität einer QF [c,b] bleibt bei Übergang zu der gespiegelten QF [1-Pc,Pb] erhalten. Das Verschwinden der Elemente der Stabilitätsmatrizen M für $ß^T$ und $ß^*$ folgt aus Lemma 6.1(iv). (iii) Wie schon im Beweis von Satz 4.9 gezeigt wurde, gilt für die Normalform X^* des zu ß gespiegelten RKV $ß^*$ mit $k=[(p-1)/2]$

$$|X^*| = |X^*(Q)| = |X(-Q^T)| \ . \tag{7.1}$$

Hat das RKV positive Gewichte, so ist $M=\underline{0}$ nach Satz 6.5(ii) äquivalent dazu, daß die Residuenmatrix Q der Normalform Y (oder X für $p\geq 2$) antisymmetrisch ist ($Q=-Q^T$). Damit folgt aus (7.1) für ein extrem stabiles RKV $|X^*(Q)| = |X(-Q^T)| = |X(Q)| = 0$, was ein Widerspruch zu $|A| = |X| \neq 0$ bedeutet. □

Die Eigenschaft (iii) kommt aufgrund funktionentheoretischer Überlegungen nicht überraschend, denn die Eigenschaft $|W(Z)|\equiv 1$ auf der imaginären Achse (cf. Lemma 6.6) gilt auch im Grenzfall $|z_i|\to\infty$. Die Grenzwert-Formel (4.41) für $l=k$ schließt aufgrund der Bedingung $Q=-Q^T$ für algebraisch stabile RKV mit $M=\underline{0}$ ferner auch ein 'L-stabiles' Verhalten ($\lim W(z) = \alpha$ mit $|\alpha|<1$ für $|z|\to\infty$) aus. Somit müssen die hier betrachteten RKV ein Grenzwertverhalten

$$\lim_{|z|\to\infty} W(z) = \pm 1 \tag{7.2}$$

besitzen, das in folgendem Korollar konkretisiert wird.

Korollar 7.2

Algebraisch stabile RKV mit $M=\underline{0}$ haben die Eigenschaften

(i) $\operatorname{Re}\lambda_i(C) = 0$, $i=1,\ldots,s$;

$$\operatorname{Re}\lambda_i(A) = (b^T x^i)^2/(2x^{iT}Bx^i) \geq 0 \ , \ i=1,\ldots,s \ , \text{ wobei} \qquad (7.3)$$

x^i die Eigenvektoren von A zu $\lambda_i(A)$ sind ;

(ii) $a_{ii} = \frac{1}{2} b_i > 0$, $i=1,\ldots,s$, $\operatorname{Spur}(A) = \frac{1}{2}$, $\operatorname{Spur}(C) = 0$;

(iii) Mit $k=[(p-1)/2]$ ist

$$\det(A) = \begin{cases} \frac{k!}{(2k)!} \det(Q) \ , \text{ falls k gerade} \ , \\ \frac{(k+1)!}{(2(k+1))!} \det(\hat{Q}) \ , \text{ falls k ungerade} \ ; \end{cases} \qquad (7.4)$$

(iv) A, A^T und A^* sind ähnlich ;

(v) $$\lim_{|z|\to\infty} W(z) = (-1)^{\operatorname{Rang}(A)} \ . \qquad (7.5)$$

Beweis. Da C antisymmetrisch ist, folgt $\operatorname{Re}\lambda_i(C)=0$ $(i=1,\ldots,s)$. Ferner gilt für alle Eigenvektoren von A zu $\lambda_i(A)$: $0 = x^{iT}Mx^i = x^{iT}BAx^i + x^{iT}A^TBx^i - x^{iT}bb^Tx^i = \lambda_i(A)x^{iT}Bx^i + \bar{\lambda}_i(A)x^{iT}Bx^i - (b^Tx^i)^2 = 2\operatorname{Re}\lambda_i(A)x^{iT}Bx^i - (b^Tx^i)^2$. Wegen $B>0$ folgt daraus der zweite Teil der Behauptung (i). (ii) ist äquivalent zu $w_{ii}=0$ $(i=1,\ldots,s)$, sowie $\operatorname{Sp}(X)=1/2$ bzw. $\operatorname{Sp}(C)=0$. (iii) folgt aus (4.40), wobei die Antisymmetrie von Q zu beachten ist. Da $M=\underline{0}$ äquivalent ist zu $A^*=A^T$ und $A^T=(PB)^{-1}A^T(PB) \cong A$, folgt (iv). Schließlich erhält man aus $W(z) = |I + zA|/|I - zA|$ ein rationales Polynom mit Zähler- und Nenner-Grad Rang(A). Für $|z|\to\infty$ ergibt sich die behauptete Formel (7.5). □

In § 6 wurden SINGLY-RKV betrachtet, die den Vorteil einer relativ zeitsparenden Implementierung gepaart mit akzeptabler Genauigkeit und Stabilität ($s\geq 6$) hatten. Leider gilt für diese Verfahrens-Klasse folgendes Resultat.

Satz 7.3

Es existieren keine algebraisch stabilen SINGLY-RKV mit $M=\underline{0}$ der Ordnung $p \geq 3$.

Beweis. Aufgrund von Korollar 7.2(iv) und $\lambda_i(A) \equiv \gamma$ $(i=1,\ldots,s)$ für SINGLY-RKV hat die Stabilitätsfunktion W die Gestalt

$$W(z) = \frac{|I + zA|}{|I - zA|} = \left(\frac{1 + \gamma z}{1 - \gamma z}\right)^s \quad . \tag{7.6}$$

Für $|z| < \frac{1}{\gamma} \leq 2s$ läßt sich W(z) in eine Potenzreihe entwickeln

$$W(z) = \sum_{\mu=0}^{\infty} \left(\sum_{\nu=0}^{\mu} \binom{s}{\nu} \binom{s-1+\mu-\nu}{\mu-\nu} \right) (\gamma z)^\mu$$

$$= 1 + 2s\gamma\, z + 2s^2\gamma^2\, z^2 + \frac{2}{3}s(2s^2+1)\gamma^3\, z^3 + \ldots\ldots \quad . \tag{7.7}$$

Wäre W(z) eine Approximation an exp(z) der Ordnung $p \geq 3$, so müßte $W(z) - \exp(z) = O(z^4)$ $(|z| \to 0)$ gelten, was ein Widerspruch zu obigen Koeffizienten ergibt. Damit hat W(z) der Gestalt (7.6) die Höchstordnung 2 (für bel. s) und damit auch das Verfahren keine höhere Ordnung p. □

Die Schranke in obigem Satz ist scharf. Aus dem Beweis ist ferner ersichtlich, daß p=2 nur für $\gamma = 1/2s = 1/4$ angenommen wird. Algebraisch stabile SINGLY-RKV mit $M=\underline{0}$ und p=s=2 werden bei gegebener positiver QF ($p_{QF}=2$) durch die Normalform

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -u \\ u & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad u := \pm\frac{1}{4} \tag{7.8}$$

erzeugt.

Beispiel.

Für die 2-stufige Lobatto-QF $[c,b] := [\binom{0}{1}, \binom{1/2}{1/2}]$ (p=2) ergibt sich ein algebraisch stabiles SINGLY-RKV mit p=s=2 und $M=\underline{0}$ zu

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b \end{array} \equiv \begin{array}{c|cc} 0 & 1/4 & 0 \\ 1 & 1/2 & 1/4 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \quad . \tag{7.9}$$

Korollar 7.4

Algebraisch stabile SINGLY-RKV der Ordnung $p \geq 3$ haben eine Stabilitätsmatrix M mit $M \neq \underline{0}$.

Konstruktion.

Satz 6.5(b) zusammen mit Satz 2.6 liefern uns bei gegebener positiver QF eine konstruktive Charakterisierung aller algebraisch stabilen RKV der Ordnung p mit verschwindender Stabilitätsmatrix M. Ein Konstruktions-Algorithmus in Stichworten lautet wie folgt.

- Wähle eine positive QF $[c,b] = [(c_1,..,c_s)^T,(b_1,..,b_s)^T]$ mit paarweise verschiedenen Stützstellen und der (Mindest-) Ordnung p ;
- Setze $W := (p_{j-1}(c_i))_{i,j=1}^{s}$ mit

$$p_n(t) := \sqrt{2n+1} \sum_{\nu=0}^{n} \binom{n}{\nu}\binom{n+\nu}{\nu}(-1)^{n+\nu} t^{\nu} \quad \text{(Legendre-Polynome)};$$

- Setze $D := W^T B W$, $k := [(p-1)/2]$, $\xi_j := (4(4j^2-1))^{-1/2}$ $(j \geq 1)$, $l := s-k$, $t := l(l-1)/2$,

$$Q := \begin{pmatrix} 0 & -u_1 & & -u_{l-1} \\ u_1 & & & \\ & & & -u_t \\ u_{l-1} & & u_t & 0 \end{pmatrix} , \quad X := \begin{pmatrix} 1/2 & -\xi_1 & & \\ \xi_1 & 0 & & 0 \\ & & 0 & -\xi_k \\ & 0 & \xi_k & Q \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ k \\ \\ k \end{matrix} ; \quad (7.10)$$

- $\mathcal{B} = [c,A,b]$ mit $A := W D^{-1} X D^{-1} W^T B = A(u_1,\ldots,u_t)$ ist ein s-stufiges algebraisch stabiles RKV der Ordnung p mit $M=\underline{0}$ und t frei verfügbaren Parametern $u_1,\ldots,u_t$ $(t=t(s,p))$. •

Ist die Ordnung der QF $[c,b]$ gerade $(p=2k+2)$, so ist wegen $q_{11} = (Q)_{11} = 0$ auch die Ordnung des konstruierten RKV mit $M=\underline{0}$ gerade. Zu jeder Stufenzahl $s \geq 1$ und jeder Ordnung $p \leq 2s$ existieren somit algebraisch stabile RKV $\mathcal{B}$ mit $M=\underline{0}$.

Verallgemeinerte Radien.

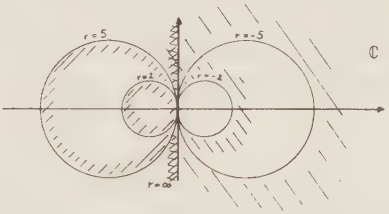
Nach Lemma 7.1(iii) existieren keine algebraisch stabilen RKV mit $M=\underline{0}$ und $\lim W(z) = 0$ für $|z| \to \infty$ ('Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$'). Für die numerische Behandlung von DGL-Systemen, deren Eigenwerte (der Jakobimatrix) große negative Realteile besitzen (→Eigenlösungen), ist jedoch ein Verfahren mit einer Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ erwünscht. Folgende Alternativen sind denkbar :

- Einschränkung der Schrittweite $h>0$, sodaß $h\lambda_i((\frac{\partial f}{\partial y})(y(t)))$ in einem Bereich hinreichender Dämpfung liegen $(i=1,\ldots,m)$;
- Erzwingung der Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ durch Zulassen von $M\geq 0$, $M\neq 0$, jedoch mit minimalstem $\lambda_{max}(B^{-1/2}MB^{-1/2})$. (7.11)

Für unübersichtliche DGL-Systeme ist die erste Methode i.A. nicht sehr geeignet, da zusätzliche Implementierungs- und damit Rechenzeit-Kosten auftreten.Die zweite Methode läuft im wesentlichen auf ein Optimierungs-Problem hinaus, den Störterm u^HMu bzgl. des Skalarproduktes $\langle x,y\rangle = x^TBy$ minimal zu halten. Eine genaue Begründung der Forderung (7.11) ist mittels der von Dahlquist-Jeltsch [1979] eingeführten 'verallgemeinerten Kreisscheiben' $D_r \in \mathbb{C}$ $(-\infty\leq r\leq+\infty)$ möglich:

$$D_r := \{z = x+iy\in\mathbb{C} \mid \begin{array}{ll} (x-r)^2+y^2 \leq r^2 & \text{für } r\geq 0 \\ (x-r)^2+y^2 \geq r^2 & \text{für } r\leq 0 \\ x=0\ ,\ y\in\mathbb{R} & \text{für } r=\pm\infty \end{array} \} . \qquad (7.12)$$

Skizze.



Die verallgemeinerten Radien $r = r(ß)$ hängen nur von den Koeffizienten des RKV $ß=[c,A,b]$ ab. Für $z := h\lambda_{max}((\frac{\partial f}{\partial y})(y)) \in D_r$ kann jedes dissipative DGL-System von einem RKV mit der Schrittweite h numerisch kontraktiv (cf. Definition 1.2) gelöst werden. In Dahlquist-Jeltsch [1979] wurde ferner für (explizite oder implizite) RKV mit positiven Gewichten eine explizite Formel für den verallgemeinerten Radius r hergeleitet, wobei $M = BC+C^TB$ die Stabilitätsmatrix des Verfahrens ß bezeichnet :

$$r(ß) = \begin{cases} -\dfrac{1}{\lambda_{min}(B^{-1/2}M\,B^{-1/2})} & \text{falls } \lambda_{min} \neq 0 \\ \infty & \text{sonst .} \end{cases} \qquad (7.13)$$

Lemma 7.5

Für den verallgemeinerten Radius $r=r(\mathcal{B})$ eines RKV $\mathcal{B}$ mit positiven Gewichten gilt :

$$\text{(i)}\quad r(\mathcal{B}) = \begin{cases} -1/\lambda_{\min}(A^T - A^*) \text{ , falls } \lambda_{\min} \neq 0 \\ \infty \qquad\qquad \text{sonst .} \end{cases} \tag{7.14}$$

$$\text{(ii)}\quad r(\mathcal{B}^T) = r(\mathcal{B}) \text{ und } r(\mathcal{B}^*) = \begin{cases} 1/\lambda_{\max}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) \text{ f. } \lambda_{\max} \neq 0 \\ \infty \qquad\qquad \text{sonst .} \end{cases} \tag{7.15}$$

$$\text{(iii)}\quad r(\mathcal{B}) \leq \begin{cases} (-2 \min_i \{\operatorname{Re} \lambda_i(C)\})^{-1}, \text{falls } \min\{\ldots\} \neq 0 \\ \infty \qquad\qquad \text{sonst .} \end{cases} \tag{7.16}$$

Beweis. $B=\operatorname{diag}(b_1,\ldots,b_s)$ ist regulär, also gilt

$$\lambda_{\min}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) = \lambda_{\min}(B^{-1}M) = \lambda_{\min}(A + B^{-1}A^T B - \mathbb{1}b^T)$$

$$= \lambda_{\min}(P(B^{-1}A^T B)P - P(\mathbb{1}b^T - A)P) = \lambda_{\min}(A^T - A^*).$$

Ferner ist $M^T = PMP$ und $B^T = PBP$, woraus sich die erste Beziehung aus (ii) ergibt. Wegen $M^* = -PMP$ und $B^* = PBP$ ist

$$\lambda_{\min}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) = \lambda_{\min}(-B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) = -\lambda_{\max}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}).$$
$\mathcal{B}^*$

Weiter ist

$$\lambda_{\min}(B^{-1}M) = \lambda_{\min}(C + B^{-1}C^T B) = \lambda_{\min}(B^{1/2} C\, B^{-1/2} + (B^{1/2} C B^{-1/2})^T)$$

$$\leq 2 \min_i \{\operatorname{Re} \lambda_i(B^{1/2} C B^{-1/2})\} = 2 \min_i \{\operatorname{Re} \lambda_i(C)\} . \qquad \square$$

Für RKV mit positiven Gewichten und $M=\underline{0}$ ergibt sich somit $r(\mathcal{B})=r(\mathcal{B}^T)$ $=r(\mathcal{B}^*)= +\infty$. Umgekehrt folgt aus $r(\mathcal{B})=r(\mathcal{B}^*)= \infty$, daß gilt

$$0 = \lambda_{\max}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) = \lambda_{\min}(B^{-1/2} M\, B^{-1/2}) ,$$

und aus der Symmetrie von $B^{-1/2} M\, B^{-1/2}$ die Eigenschaft $M = \underline{0}$. Man beachte ebenfalls die obere Schranke von $r(\mathcal{B})$ mittels den Realteilen der Eigenwerte von C aus (7.16). Je kleiner die Realteile von $\lambda_i(C)$ sind, desto näher liegt $r(\mathcal{B})$ bei $+\infty$. Dies ist ein weiteres Indiz dafür, daß bei der Durchführung eines RKV mit $M=\underline{0}$ keine permanente Überdämpfung stattfindet. Wünschenswert ist also einerseits ein unendlicher verallgemeinerter Radius r und andererseits kleine Realteile der Eigenwerte von C.

Die Forderung (7.11) bedeutet somit aufgrund (7.15) ein möglichst geringes Gebiet einer Überdämpfung. Ein in Frage kommender Ansatz für die Konstruktion von RKV mit minimalem $\lambda_{max}(B^{-1/2}M\,B^{-1/2})$ wäre (cf. Satz 2.6 bzw. (7.10) mit $Y=X-\frac{1}{2}E_{11}$)

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -\xi_1 & & & 0 \\ \xi_1 & \ddots & & & \\ & \ddots & 0 & -\xi_k & \\ & & \xi_k & \ddots & \\ 0 & & & & Q \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ k \\ \\ \\ \end{matrix} \qquad (7.17)$$

mit $Q = P + U$, $P = \begin{pmatrix} 0 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & p_1 \end{pmatrix}$ und $U = -U^T$ (cf.(7.10)) . (7.18)

Satz 7.6

Zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein irreduzibles, algebraisch stabiles RKV der Ordnung $p \leq 2s-2$ mit $\lim W(z) = 0$ $(|z|\to\infty)$ und $\lambda_{max}(B^{-1/2}M\,B^{-1/2}) \leq \varepsilon$.

Die Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ für RKV hängt im Punkt 0 unstetig von der Stabilitätsmatrix M bzw. von den Elementen des Verfahrens ab. Analoge Eigenschaften für die verallgemeinerten Radien $r=r(\beta)$ werden in Dahlquist-Jeltsch[1979] angegeben.

Beweis. Sei eine positive QF der Ordnung p gegeben. Setze $k=\lceil (p-1)/2 \rceil$ und $l=s-k$. Betrachte das RKV $\beta=[c,A,b]$, dessen Verfahrensmatrix A durch den Ansatz (7.17) mit Q aus (7.18) und $q_1>0$ gebildet wird (cf. (7.10)) :

$$A := W\,D^{-1}Y\,D^{-1}W^TB + \frac{1}{2}\mathbb{1}\,b^T \ .$$

β ist offensichtlich algebraisch stabil. Es besitzt genau dann die Eigenschaft der 'Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ ' ($\lim W(z)=0, |z|\to\infty$), wenn (cf. Satz 4.9)

$$2(2k+1)\,!\,|Q| = |\hat{Q}| \neq 0 \ . \qquad (7.19)$$

Bezeichnet man mit $\tilde{U}$ die linke obere $(l-1)\times(l-1)$-Teilmatrix von Q und mit $\hat{\tilde{U}}$ die entsprechende $(l-1)\times(l-1)$-Teilmatrix von $\hat{Q}$, wobei $Q = \left(\begin{array}{c|c} \times & \times \\ \hline \times & \hat{\tilde{U}} \end{array}\right)$, so ergibt sich für Verfahren mit $p \leq 2s-2$ aus (7.19) die Bedingung für q_1 (>0) :

$$p_1 = \begin{cases} 2(2(s-l)+1)\,|U|/|\hat{\tilde{U}}| & \text{, falls l gerade ,} \\ (2(2(s-l)+1))^{-1}\,|\hat{U}|/|\tilde{U}| & \text{, falls l ungerade .} \end{cases} \qquad (7.20)$$

Dieser wert p_1 in Abhängigkeit der Parameter in U kann beliebig klein gewählt werden, so daß zu vorgegebenem $\varepsilon>0$

$$\lambda_{max}(B^{-1/2}M\,B^{-1/2}) = 2\,p_1 \leq \varepsilon \qquad \text{wird.} \quad \square$$

Verfahrens-Scharen

Im folgenden werden einige Scharen von algebraisch stabilen RKV ß mit $M=\underline{0}$ bzw. $M\neq 0$ und minimalem $\lambda_{max}(B^{-1/2}MB^{-1/2})$ angegeben. Dabei auftretende Parameter $u_1,\ldots,u_t$ $(t=l(l-1)/2,\ l=s-k)$ sind hinsichtlich gewisser Kriterien gewählt.

Verfahren I

$$s = 3\ ,\ p = 4\ ,\ QF\ [c,b] = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ (1/2) & \frac{1}{6}(4) \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\ \text{(Lobatto)}\ ;$$

$$ß = \left[\begin{matrix}0\\(1/2)\\1\end{matrix}\ ,\ \begin{pmatrix} \frac{1}{12} & -\frac{\sqrt{6}}{3}q & \frac{\sqrt{6}}{3}q - \frac{1}{12} \\ \frac{1}{6} + \frac{\sqrt{6}}{12}q & \frac{1}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{12}q \\ \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{6}}{3}q & \frac{2}{3} + \frac{\sqrt{6}}{3}q & \frac{1}{12} \end{pmatrix}\ ,\ \begin{matrix}1/6\\(2/3)\\1/6\end{matrix}\right] .$$

Spezialfälle:

(1) $q:=0$: $III_E(3)$-Verfahren von Nørsett-Wanner[1982].

(2) $q:=\sqrt{6}/24 \approx 0.102062$:

$$A = \frac{1}{48}\begin{pmatrix} 4 & -4 & 0 \\ 9 & 16 & -1 \\ 8 & 36 & 4 \end{pmatrix} .$$

Verfahren II

$$s = 3\ ,\ p = 4\ ,\ QF\ [c,b] = \begin{bmatrix} \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2-\sqrt{2} \\ 2 \\ 2+\sqrt{2} \end{pmatrix} & \frac{1}{3}(1) \end{bmatrix}\ \text{(Tschebyscheff)}\ ;$$

$$ß = \left[\begin{matrix}\frac{1}{4}\begin{pmatrix} 2-\sqrt{2} \\ 2 \\ 2+\sqrt{2} \end{pmatrix}\end{matrix}\ ,\ \frac{1}{60}\begin{pmatrix} 10 & 10-5\sqrt{2}-8\sqrt{30}q & 10-10\sqrt{2}+8\sqrt{30}q \\ 10+5\sqrt{2}+8\sqrt{30}q & 10 & 10-5\sqrt{2}-8\sqrt{30}q \\ 10 & 10+5\sqrt{2}+8\sqrt{30}q & 10 \end{pmatrix}\ ,\ \begin{matrix}\frac{1}{3}(1)\end{matrix}\right] .$$

Spezialfälle:

(1) $q := \sqrt{30}(\sqrt{2}-1)/24$:

$$A = \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 2 & 4-3\sqrt{2} & 0 \\ 3\sqrt{2} & 2 & 4-3\sqrt{2} \\ 4 & 3\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} .$$

(2) $q := \sqrt{30}(2-\sqrt{2})/48$:

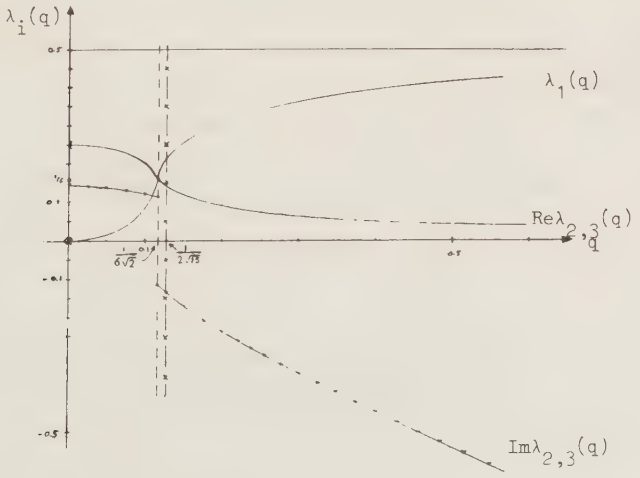
$$A = \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 4-3\sqrt{2} \\ 4 & 2 & 0 \\ 3\sqrt{2} & 4 & 2 \end{pmatrix} .$$

Bemerkungen zu den Verfahren I und II.

Die beiden Verfahren I und II unterscheiden sich nur in der Wahl der QF [c,b], die zugrunde liegende Normalform S (oder Y) ist in beiden Fällen dieselbe. Das Verfahren I führt für q=0 auf eine in Nørsett-Wanner [1982] eingeführte Klasse (III_E) von Verfahren der Ordnung 2s-2. Diese führen zwar bzgl. der Stabilitätsfunktion W auf diagonale Padé-Approximationen an exp(z), sind aber für die Praxis wegen Q=0 nicht von großem Interesse.

Für die Wahl des Parameters q (>0) kann die Eigenwertverteilung von A in Abhängigkeit von q nützlich sein. Die Eigenwerte $\lambda_i(A) = \lambda_i(q)$ (i=1,2,3) von A sind in folgender Skizze als Funktion von q aufgetragen.

Skizze.



Verfahren III

$s = 4$, $p = 4$, QF $[c,b] = [\begin{pmatrix}0\\1/3\\2/3\\1\end{pmatrix}, \frac{1}{8}\begin{pmatrix}1\\3\\3\\1\end{pmatrix}]$;

$ß = [c,A,b]$ mit

$$A = \begin{bmatrix} \frac{1}{16} & \frac{1}{16}-\frac{1}{4}\alpha-\frac{5}{18}\beta-\frac{1}{36}\gamma & \frac{1}{16}+\frac{5}{18}\beta+\frac{5}{18}\gamma & \frac{1}{16}+\frac{1}{4}\alpha-\frac{1}{4}\gamma \\ \frac{5}{48}+\frac{1}{12}\alpha+\frac{5}{54}\beta+\frac{1}{108}\gamma & \frac{3}{16} & \frac{1}{16}-\frac{1}{12}\alpha-\frac{11}{108}\gamma & -\frac{1}{48}-\frac{5}{54}\beta+\frac{5}{54}\gamma \\ \frac{7}{48}-\frac{5}{54}\beta-\frac{5}{54}\gamma & \frac{5}{16}+\frac{1}{12}\alpha+\frac{11}{108}\gamma & \frac{3}{16} & \frac{1}{48}-\frac{1}{12}\alpha+\frac{5}{54}\beta-\frac{1}{108}\gamma \\ \frac{3}{16}-\frac{1}{4}\alpha+\frac{1}{4}\gamma & \frac{7}{16}+\frac{5}{18}\beta-\frac{5}{18}\gamma & \frac{5}{16}+\frac{1}{4}\alpha-\frac{5}{18}\beta+\frac{1}{36}\gamma & \frac{1}{10} \end{bmatrix},$$

wobei $\alpha := \sqrt{15}\, q_1$, $\beta := \sqrt{21}\, q_2$, $\gamma := \sqrt{35}\, q_3$.

Spezialfall:

Für $q_3 = 0$ (bzw. $\gamma = 0$) erhält man ein total symmetrisches RKV (cf. § 6) .

Verfahren IV

$s = 3$, $p = 4$, Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$, QF $[c,b] = [\overset{0}{(1/2)}, \overset{1}{\frac{1}{6}(4)}]$;

$$ß = [\overset{0}{(1/2)}, \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 1+24q^2 & -4q(\sqrt{6}+12q) & -1+4\sqrt{6}q+24q^2 \\ 2+\sqrt{6}q-12q^2 & 4(1+6q^2) & -q(\sqrt{6}+12q) \\ 3-4\sqrt{6}q+24q^2 & 4(2+\sqrt{6}q-12q^2) & 1+24q^2 \end{bmatrix}^{1}_{1}, \overset{1}{\frac{1}{6}(4)}]\ .$$

Spezialfälle:

(1) $q := 1/10$: $r(ß) = -50/3 \approx -16.7$.

(2) $q := \sqrt{6}/12$: $r(ß) = -4$ und

$$A = \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 2 & -4 & 2 \\ 2 & 5 & -1 \\ 2 & 4 & 2 \end{pmatrix} \equiv A_{III_C}(3) \quad \text{(Chipman[1971])}.$$

Verfahren V

$s = 4$, $p = 4$, Dämpfung im Punkt $\{\infty\}$ für $\alpha := \frac{1}{6}(\frac{q_1}{q_2})^2 \neq 0$,

QF $[c,b] = [(0, \frac{5-\sqrt{5}}{10}, \frac{5+\sqrt{5}}{10}, 1)^T, \frac{1}{12}(1,5,5,1)^T]$ (Lobatto) ;

$$\mathcal{B} = \left[\frac{1}{10}\begin{pmatrix} 0 \\ 5-\sqrt{5} \\ 5+\sqrt{5} \\ 10 \end{pmatrix}, \; A(q_1,q_2,q_3,\alpha), \; \frac{1}{12}\begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix} \right],$$

mit $A = A(q_1,q_2,q_3,\alpha) =$

$$\frac{1}{12}\begin{bmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{3}}{6}+\sqrt{5}q_2-\sqrt{3}q_3 & \sqrt{3}(q_2-q_1) & \sqrt{3}(q_3-\alpha)-\sqrt{5}q_1 \\ \frac{1}{2}\frac{\sqrt{5}}{10} & -\frac{\sqrt{3}}{6}\frac{\sqrt{5}}{5}q_2+\frac{\sqrt{15}}{5}q_3 & \frac{\sqrt{15}}{5}(q_2+q_1) & \frac{\sqrt{15}}{5}(q_3+\alpha)+\frac{\sqrt{5}}{5}q_1 \\ \frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{10} & -\frac{\sqrt{3}}{6}\frac{\sqrt{5}}{5}q_2-\frac{\sqrt{15}}{5}q_3 & -\frac{\sqrt{15}}{5}(q_2+q_1) & -\frac{\sqrt{15}}{5}(q_3+\alpha)+\frac{\sqrt{5}}{5}q_1 \\ 1 & -\frac{\sqrt{3}}{6}+\sqrt{5}q_2+\sqrt{3}q_3 & \sqrt{3}(q_1-q_2) & \sqrt{3}(\alpha-q_3)-\sqrt{5}q_1 \end{bmatrix} \cdot$$

$$\cdot \begin{bmatrix} 1 & 5 & 5 & 1 \\ -\sqrt{3} & -\sqrt{15} & \sqrt{15} & \sqrt{3} \\ \sqrt{5} & -\sqrt{5} & -\sqrt{5} & \sqrt{5} \\ -\sqrt{3} & \sqrt{15} & -\sqrt{15} & \sqrt{3} \end{bmatrix} .$$

Spezialfälle:

(1) $q_2 := 1/2\sqrt{15}$, $q_3 := 0$: (Dämpfung im Punkt $\{\infty\} <=> \alpha = 10q_1^2 > 0$)

$\mathcal{B}$ ist ein Verfahren der Ordnung $p = 6$.

(2) $q_1 := q_3 := 0$, $q_2 := 1/2\sqrt{15}$: (=> $\alpha = 0$)

$\mathcal{B}$ ist identisch mit dem $III_E(4)$-Verfahren von Nørsett-Wanner [1982].

Anhang

Übersicht.

A 1. Tabelle der Werte s_{ql} für $1 \leq l \leq q \leq 10$ aus § 2.

A 2. Weitere Eigenschaften von reell positiven Funktionen.

A 3. Tabelle der Polynome Δ_n^* und ϕ_n^* aus § 3 für $0 \leq n \leq 7$.

A 4. Beweis von Satz 3.12.

A 5. Beweis von Lemma 5.10.

A 6. Programm zur Bestimmung der Grundform $S = V^T_{BCV}$ mit Rechenbeispielen.

A 1. Tabelle der Werte $s_{ql} = \frac{q-l}{2ql(q+1)}$ für $1 \leq l \leq q \leq 10$.

s_{ql}	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	l
1	0										
2	$\frac{1}{12}$	0									
3	$\frac{1}{18}$	$\frac{1}{60}$	0								
4	$\frac{3}{40}$	$\frac{1}{48}$	$\frac{1}{168}$	0							
5	$\frac{1}{15}$	$\frac{3}{140}$	$\frac{1}{120}$	$\frac{1}{360}$	0						
6	$\frac{5}{84}$	$\frac{1}{48}$	$\frac{1}{108}$	$\frac{1}{240}$	$\frac{1}{660}$	0					
7	$\frac{3}{56}$	$\frac{5}{252}$	$\frac{1}{105}$	$\frac{3}{616}$	$\frac{1}{420}$	$\frac{1}{1092}$	0				
8	$\frac{7}{144}$	$\frac{3}{160}$	$\frac{5}{528}$	$\frac{1}{192}$	$\frac{3}{1040}$	$\frac{1}{672}$	$\frac{1}{1680}$	0			
9	$\frac{2}{45}$	$\frac{7}{396}$	$\frac{1}{108}$	$\frac{5}{936}$	$\frac{1}{315}$	$\frac{1}{540}$	$\frac{1}{1008}$	$\frac{1}{2448}$	0		
10	$\frac{9}{220}$	$\frac{1}{60}$	$\frac{7}{780}$	$\frac{3}{560}$	$\frac{1}{300}$	$\frac{1}{480}$	$\frac{3}{2380}$	$\frac{1}{1440}$	$\frac{1}{3420}$	0	
q	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:

A 2. Weitere Eigenschaften reell positiver Funktionen.

Zusätzlich zu den in Lemma 1.6 aufgeführten Eigenschaften von RPF gelten (cf. Dahlquist[1978a][1978b]) :

(i) $a\, z^{\alpha} \in \mathbb{P}$, falls $\alpha \in \mathbb{R}$, $0 \neq a \in \mathbb{C}$ und $|\arg(a)| < (1-|\alpha|)\frac{\pi}{2}$.

(ii) Eine rationale Funktion $f = r/s$ ist genau dann in $\mathbb{P}$, wenn f eine repräsentierbare reelle Funktion ist, dh. $\mathrm{Re}\,(r(z)\overline{s(z)})$ besitzt für alle zulässigen z eine Darstellung

$$\mathrm{Re}\,(r(z)\overline{s(z)}) = \mathrm{Re}(z)\cdot \sum_{i=o}^{k-1} |\rho_i(z)|^2 + \sum_{i=o}^{k} |\omega_i(z)|^2$$

mit linear unabhängigen Polynomen $\rho_i (i=0,\ldots,k-1)$ und Polynomen ω_i.

A 3. Tabelle der Polynome Δ_n^* und Φ_n^* für n=0,...,7.

n	$\Delta_n^*(\lambda)$	$\Phi_n^*(\lambda)$
0	0	1
1	1	λ
2	λ	$\lambda^2 + \frac{1}{12}$
3	$\lambda^2 + \frac{1}{60}$	$\lambda^3 + \frac{1}{10}\lambda$
4	$\lambda^3 + \frac{1}{42}\lambda$	$\lambda^4 + \frac{3}{28}\lambda^2 + \frac{1}{1680}$
5	$\lambda^4 + \frac{1}{36}\lambda^2 + \frac{1}{15120}$	$\lambda^5 + \frac{1}{9}\lambda^3 + \frac{1}{1008}\lambda$
6	$\lambda^5 + \frac{1}{33}\lambda^3 + \frac{1}{7920}\lambda$	$\lambda^6 + \frac{5}{44}\lambda^4 + \frac{1}{792}\lambda^2 + \frac{1}{665280}$
7	$\lambda^6 + \frac{5}{156}\lambda^4 + \frac{1}{5720}\lambda^2 + \frac{1}{8648640}$	$\lambda^7 + \frac{3}{26}\lambda^5 + \frac{5}{3432}\lambda^3 + \frac{1}{308880}\lambda$

A 4. Beweis von Satz 3.12

Wir zeigen für alle $y \in \mathbb{R}$ die Gültigkeit der Beziehung

$$\tilde{E}_\theta(y) = K_k \tilde{E}_{\chi_k}(y) \quad \text{mit} \quad K_n := (n!)^2/((2n)!(2n+1)!) \; . \tag{A4.1}$$

Für $k=[(p-1)/2]$ läßt sich die rationale Funktion $\theta = g/f$ aus (3.3) als Kettenbruch der Ordnung k mit der Residuenfunktion χ_k darstellen:

$$\theta(\lambda) = \mathop{\Phi}_{i=o}^{k-1} \frac{\xi_i^2}{\lambda} + \chi_k(\lambda) \quad \text{mit} \quad \chi_k = \xi_k^2 \, g^*/f^* \; .$$

Eine Entwichlung dieses Kettenbruches in eine rationale Funktion ergibt

$$\theta(\lambda) = \frac{(\Delta_k^*(\lambda) + \Delta_{k-1}^*(\lambda)\,\chi_k(\lambda))\, f^*(\lambda)}{(\Phi_k^*(\lambda) + \Phi_{k-1}^*(\lambda)\,\chi_k(\lambda))\, f^*(\lambda)} = \frac{g(\lambda)}{f(\lambda)} \tag{A4.2}$$

mit den Polynomen Δ_n^* und Φ_n^* aus (3.17). Aufgrund der Rekursionsformeln (3.17) für Δ_n^* und Φ_n^* sowie (3.23) sind folgende Eigenschaften zu zeigen (K_n aus (A4.1)) :

(a) $\Delta_{n+1}^*(\lambda)\,\Phi_n^*(-\lambda) + \Delta_n^*(\lambda)\,\Phi_{n+1}^*(-\lambda) = K_n \quad (n \geq 0)$; (A4.3)

(b) $\Delta_{n+1}^*(\lambda)\,\Phi_n^*(\lambda) - \Delta_n^*(\lambda)\,\Phi_{n+1}^*(\lambda) = (-1)^n K_n \quad (n \geq 0)$; (A4.4)

(c) $\Delta_n^*(iy)\,\Phi_n^*(-iy) \in i \cdot \mathbb{R} \quad (n \geq 0 \, , \; y \in \mathbb{R})$; (A4.5)

(d) $\Delta_n^*(iy)\,\Phi_{n+1}^*(-iy) \in \mathbb{R} \quad (n \geq 0 \, , \; y \in \mathbb{R})$. (A4.6)

Damit erhält man aus (A4.2) unter Verwendung von (A4.5)

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_\theta(y) &= \mathrm{Re}\,\{g(iy)\,f(-iy)\} \\
&= |f^*(iy)|^2 \,\mathrm{Re}\,\{(\Delta_k^*(iy) + \Delta_{k-1}^*(iy)\,\chi_k(iy))(\Phi_k^*(-iy) + \Phi_{k-1}^*(-iy)\cdot \\
&\quad \cdot \chi_k(-iy))\} \\
&= |f^*(iy)|^2 \,\mathrm{Re}\,\{\underbrace{\Delta_k^*(iy)\Phi_k^*(-iy)}_{\in i\cdot\mathbb{R}} + \Delta_k^*(iy)\Phi_{k-1}^*(-iy)\chi_k(-iy) + \\
&\quad + \Delta_{k-1}^*(iy)\Phi_k^*(-iy)\chi_k(iy) + \underbrace{\Delta_{k-1}^*(iy)\Phi_{k-1}^*(-iy)}_{\in i\cdot\mathbb{R}}|\chi_k(iy)|^2\} \\
&= |f^*(iy)|^2 \,\mathrm{Re}\,\{\Delta_k^*(iy)\Phi_{k-1}^*(-iy)\chi_k(-iy) + \Delta_{k-1}^*(iy)\Phi_k^*(-iy)\chi_k(iy)\}.
\end{aligned}$$

Mittels (3.43) ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_\theta(y) &= |f^*(iy)|^2 \,\mathrm{Re}\,\{K_{k-1}\overline{\chi_k(iy)} + \Delta_{k-1}^*(iy)\Phi_k^*(-iy)|\chi_k(iy)-\overline{\chi_k(iy)}|\} \\
&= |f^*(iy)|^2 \, K_{k-1}\,\mathrm{Re}\{\chi_k(iy)\} = |f^*(iy)|^2 \, K_{k-1}\xi_k^2 \,\mathrm{Re}\,\{g^*(iy)/f^*(iy)\} \\
&= K_k \,\mathrm{Re}\,\{g^*(iy)\,f^*(-iy)\} = K_k \, \tilde{E}_{\chi_k}(y) \; .
\end{aligned}$$

□

A 5. Beweis von Lemma 5.10

Die Behauptungen (a) und (b) ergeben sich aus den Eigenschaften $s_\gamma = Sp(X) \geq 1/2$ (bzw. $Sp(Y) \geq 0$) und $\det(X) = \gamma^s \geq 0$ mittels Satz 4.9 und Lemma 5.7 . Bezeichnen x^i die Hauptvektoren von A zu $\lambda_i(A)$ $(i=1,\ldots,s)$, so ist für $i=1,\ldots,s$:

$$x^{iH}(BA + A^TB - 2\gamma B)\, x^i = 0 \quad . \tag{A5.1}$$

Mittels der orthonormierten Transformations-Matrix W ergibt sich ($W^TBAW = X = W^{-1}AW$ und $w^i := W^TBx^i$) aus (A5.1)

$$w^{iH}(X + X^T - 2\gamma I)\, w^i = 0 \quad (i=1,\ldots,s) \; . \tag{A5.2}$$

Setzt man die spezielle Gestalt von X (cf. (4.2) mit $l:=k$) in (A5.2) ein, so erhält man

$$w_1^{i\,2} + \tilde{w}^{iH}(Q + Q^T)\tilde{w}^i = 2\gamma\, w^{iH}w^i = 2\gamma \left\| w^i \right\|_2^2 \quad (i=1,\ldots,s) \; ,$$

wobei $\tilde{w}^\cdot$ der zu Q gehörende Abschnitt des Vektor $w^\cdot$ ist. Wegen $Q+Q^T \geq 0$ folgt die Behauptung (c).

Bezeichnet jetzt X die Transformations-Matrix mit $X^{-1}AX = J = \gamma I + \varepsilon$ (Jordansche Normalform von A), so folgt aus $M \geq 0$ mit $\hat{B} := X^TBX$:

$$2\gamma\, \hat{B} + \beta \geq 0 \tag{A5.3}$$

mit $\beta := \hat{B}\varepsilon + \varepsilon^T\hat{B}$. β ist nicht definit, jedoch ist $\hat{B}$ positiv definit, sodaß mit $\hat{B} =: \hat{B}^{1/2}\hat{B}^{1/2^T}$ (5.19) folgt.

Aufgrund von Satz 3.7 existiert eine zu A ähnliche Matrix X der Gestalt

$$X = \left(\begin{array}{c|c} K_k & -\xi_k \mathbb{1}_k \mathbb{1}_1^T \\ \hline \xi_k \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_k^T & Q \end{array}\right)_k \quad \text{mit} \quad K_k := \begin{pmatrix} 1/2 & -\xi_1 & & 0 \\ \xi_1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -\xi_{k-1} \\ 0 & & \xi_{k-1} & 0 \end{pmatrix} .$$

Damit muß für SINGLY's der Ordnung p ($k=[(p-1)/2\,)]$gelten :

$$\begin{aligned} |X - \lambda I_s| &= \left| \begin{array}{c|c} K_k - \lambda I_k & -\xi_k \mathbb{1}_k \mathbb{1}_1^T \\ \hline \xi_k \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_k^T & Q_{s-k} - \lambda I_{s-k} \end{array} \right| \\ &= |K_k - \lambda I_k| \cdot |(Q_{s-k} - \lambda I_{s-k}) + \xi_k^2 \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_k^T (K_k - \lambda I_k)^{-1} \mathbb{1}_k \mathbb{1}_1^T| \qquad (A5.4) \\ &= |K_k - \lambda I_k| \cdot |Q_{s-k} - \lambda I_{s-k}| + \xi_k^2\, |K_{k-1} - \lambda I_{k-1}| \cdot |Q_{s-k-1} - \lambda I_{s-k-1}| . \end{aligned}$$

Wegen $|K_n - \lambda I_n| = (-\lambda)^n D_{nn}(1/\lambda)$, wobei $D_{nn}(z)$ das Nenner-Polynom der diagonalen rationalen Padé-Approximation an exp(z) vom Grade n bezeichnet, ist

$$|X - \lambda I_s| = q_{s-k}(\lambda)\,(-\lambda)^k D_{kk}(1/\lambda) + \xi_k^2\, q_{s-k-1}(\lambda)\,(-\lambda)^{k-1} D_{k-1k-1}(1/\lambda). \tag{A5.5}$$

Hierbei sind q_{s-k} und q_{s-k-1} Polynome vom Grad s-k bzw. s-k-1. Die Polynome $(-\lambda)^n D_{nn}(1/\lambda)$ haben die explizite Gestalt (cf. Grigorieff [1971],S.124) :

$$(-\lambda)^n D_{nn}(1/\lambda) = \frac{1}{(2n)!} \sum_{\mu=o}^{n} \binom{n}{\mu} (n+\mu)!\,(-\lambda)^\mu . \tag{A5.6}$$

Setzt man ferner die Polynome q_{s-k} und q_{s-k-1} als

$$\begin{aligned} q_{s-k}(\lambda) &:= \sum_{s\mu=o}^{s-k} f_\mu\,(-\lambda)^\mu \\ q_{s-k-1}(\lambda) &:= \sum_{\mu=o} g_\mu\,(-\lambda)^\mu \quad \text{an,} \end{aligned} \tag{A5.7}$$

so ergibt sich aus (A5.5) mit $g_{s-k} := 0$ und

$$\delta_{\nu k} := \frac{k-\nu}{2(2k+1)(k+\nu)} \qquad (\nu=0,\ldots,k) : \tag{A5.8}$$

$$|X - \lambda I_s| = \sum_{\mu=o}^{s} \Big[\sum_{\nu=o}^{\mu} \binom{k}{\nu} (k+\nu)!\{f_{\mu-\nu} + \delta_{\nu k}\, g_{\mu-\nu}\}\Big]\,(-\lambda)^\mu . \tag{A5.9}$$

Koeffizientenvergleich mit

$$(\gamma - \lambda)^s = \sum_{\mu=o}^{s} \binom{s}{\mu}\, \gamma^{s-\mu}\,(-\lambda)^\mu$$

liefert die behauptete Formel (5.20).

Die Nicht-Negativität der Koeffizienten f_μ und g_μ folgt aus der Bedingung $\Theta \in \mathbb{P}$ mit $\Theta(\lambda) = \left[(\gamma + \lambda I)^{-1}\right]^\mu_{11}$, sowie Lemma 1.6(ii).

Ist p=s ungerade , so können aus (5.20)die Koeffizienten f_k und g_{k-1} in Abhängigkeit von γ explizit ermittelt werden ($\mathbf{q}$=s-1,s-2):

$$f_k = s\gamma - \frac{1}{2}$$

$$f_{k-1} = f_k \cdot (k\gamma - \frac{s-k}{2s}) = (s\gamma - \frac{1}{2})(k\gamma - \frac{s-k}{2s}) .$$

Zwischen $(\frac{1}{2s}\,,\ \frac{s+1}{2s(s-1)})$ ist $f_{k-1}(\gamma) < 0$ und $\gamma = 1/2s$ kann höchstens für ein Verfahren mit $M=\underline{0}$ angenommen werden. Allerdings existieren nach Korollar 7.4 keine SINGLY's mit $p \geq 3$ und $M=\underline{0}$, sodaß für ungerades p=s (5.21) gelten muß.

□

A 6. ALGOL-60 Programm zur Bestimmung der Grundform S.

Die Bezeichnungen seien wie in § 2 gewählt. Zu einem RKV ß=[c,A,b] wird durch unten aufgeführtes ALGOL 60-Programm die Normalform S bzgl. der Transformationsmatrix V=V(c) der geshifteten RK-Matrix $C = A - \frac{1}{2} \mathbb{1} b^T$ berechnet.

Eingegeben werden:

s	-	Stufenzahl ,
p	-	Ordnung ,
c , A , b	-	Koeffizienten des RKV ß .

Berechnet und ausgedruckt werden:

k	-	Partitionsindex ,
m , n	-	Indizes der Bedingungs-Gleichungen C(m),D(n) ,
S	-	Grundform ,
$S_{Boolean}$	-	zeigt an, welche Elemente von S=S(ß) mit den Elementen von S(G(s)) übereinstimmen(*) und welche nicht (%) ,
$S + S^T$	-	Matrix $V^T M V$.

Programm-Protokoll und Rechenbeispiele.

```
ANFANG PROTOKOLL
    10  'BEGIN'
    20C 'COMMENT'  ***********************************************************************
    30C            **  BERECHNUNG DER NORMALFORM S=V(T)BCV MIT C=A-(1B(T))/2 UND      **
    40C            **  VERGLEICH DER KOMPONENTEN VON S MIT                            **
    50C            **     S[Q,L] = (Q-L)/(Z**(L-1)*(C+L))  ,                          **
    60C            **  IDENTISCH= * , NICHT IDENTISCH= % , WEITER WERDEN M,N MIT      **
    70C            **  C(M) BZW. D(N) BESTIMMT, EINGEGEBEN WERDEN LEDIGLICH           **
    80C            **  STUFENZAHL S, KNOTENVEKTOR C, GEWICHTSVEKTOR B, KOEFFIZIENTEN**
    90C            **  MATRIX A UND DIE ORDNUNG P,                                    **
    100C           ***********************************************************************;
    110          'INTEGER' S; READ(S); 'BEGIN'  'INTEGER' P,M,N,K,I,J,Q,L;'REAL'H,E;
    120 'REAL''ARRAY' B,CC[1:S],A,S[1:S,1:S],
    130 'REAL''PROCEDURE'HOCH(X,Y);                    'REAL'X,Y;
    140 'BEGIN'   'IF'(X=0 'AND' Y=0) 'THEN' HOCH:=1 'ELSE' HOCH:=X**Y;'END';
    150 'REAL''PROCEDURE'    CE(NN,AA,CC,TIEF);
    160 'INTEGER' NN;
    170 'REAL''ARRAY' AA,CC;'REAL''PROCEDURE' TIEF;
    180 'BEGIN'  'INTEGER' II,JJ,LL; 'REAL'G;
    190 'FOR'LL:=1'STEP'1'UNTIL'(NN+1)'DO'  'BEGIN' 'FOR'II:=1'STEP'1'UNTIL'NN'DO'
    200 'BEGIN'  G:=0; 'FOR'JJ:=1'STEP'1'UNTIL' NN'DO'
    210 G:=G+AA[II,JJ]*TIEF(CC[JJ],LL-1); G:=G-TIEF(CC[II],LL)/LL;
    220 'IF' ABS(G)'GREATER'10**(-8) 'THEN''BEGIN'
    230 CE:=LL-1;'GOTO'  ENDE;  'END';
    240 'END';'END';  CE:=LL-1;    ENDE:'END';
    250 'REAL''PROCEDURE' DE(NN,AA,BB,CC,TIEF);
    260 'INTEGER' NN;
    270 'REAL''ARRAY' AA,BB,CC;'REAL''PROCEDURE' TIEF;
    280 'BEGIN'  'INTEGER' II,JJ,LL; 'REAL'G,
    290 'FOR'LL:=1'STEP'1'UNTIL'(NN+1)'DO'  'BEGIN' 'FOR'II:=1'STEP'1'UNTIL'NN'DO'
    300 'BEGIN'  G:=0; 'FOR'JJ:=1'STEP'1'UNTIL' NN'DO'
    310 G:=G+BB[JJ]*TIEF(CC[JJ],LL-1)*AA[JJ,II]; G:=G-BB[II]*(1-TIEF(CC[II],LL))/LL;
    320 'IF' ABS(G)'GREATER'10**(-8) 'THEN''BEGIN'
    330 DE:=LL-1;'GOTO'  ENDE;  'END';
    340 'END';'END';  DE:=LL-1;    ENDE:'END';
```

```
READ(C,B,A,P);
K:=ENTIER((P-1)/2);
'FOR' Q:=1 'STEP'1'UNTIL'S'DO'  'FOR'L:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO'
'BEGIN' H:=0; 'FOR'I:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO''FOR'J:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO'
H:=H+(B[I]*HOCH(C[I],Q-1)*(A[I,J]-B[J]/2)*HOCH(C[J],L-1));
SS[Q,L]:=H;   'END';     PAGE;
OUTPUT(6,'(''('ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:')',/')');
OUTPUT(6,'(''('-----------------------------------')',3/')');
M:=CE(S,A,C,HOCH);       N:=DE(S,A,B,C,HOCH);
OUTPUT(6,'(''('S=')',DD,'('  ,P=')',DD,'(' ,K=')',DD,'(' , C(')',D,'(')   ,   D(
')',D,'(')  UND')',3/')',S,P,K,M,N);
'FOR'Q:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO''FOR'L:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO'
'BEGIN'   OUTPUT(6,'('5B,-D,7D  ')',SS[Q,L]);
'IF'L=S 'THEN' OUTPUT(6,'('/')');   'END';
OUTPUT(6,'('5/')');
'FOR'Q:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO''FOR'L:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO'  'BEGIN'
E:=(Q-L)/(2*Q*L*(Q+L));
'IF' ABS(SS[Q,L]-E) 'LESS' 10**(-7) 'THEN'OUTPUT(6,'(''('       *    ')'')')
'ELSE'  OUTPUT(6,'(''('    .  %    ')'')');
'IF' L=S'THEN'OUTPUT(6,'('/')');  'END';
'IF' K'GREATER'M'THEN'OUTPUT(6,'('3/,'('C(K) IST NICHT ERFUELLT.')',3/')')
'ELSE' OUTPUT(6,'('3/,'('C(K) IST ERFUELLT.')',3/')');
OUTPUT(6,'(''('DIE MATRIX S+S(T)*V(T)MV ERGIBT SICH ZU:')',2/')');
'FOR'Q:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO''FOR'L:=1'STEP'1'UNTIL'S'DO'
'BEGIN' H:=SS[Q,L]+SS[L,Q];  'IF'ABS(H)'LESS'10**(-7) 'THEN'
OUTPUT(6,'(''('       0    ')'')') 'ELSE' OUTPUT(6,'('5B,-D.7D')',H);
'IF'L=S'THEN'OUTPUT(6,'('/')');     'END';
'END';   'END'
ENDE PROTOKOLL
```

1. G(3) :

```
1744=                                         ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=03  ,P=06 ,K=02 , C(3)   ,   D(3)  UND

   0.0000000  -0.0833333  -0.0833333
   0.0833333   0.0000000  -0.0166667
   0.0833333   0.0166667   0.0000000



       *          *          *
       *          *          *
       *          *          *


C(K) IST ERFUELLT.


DIE MATRIX S+S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

       0          0          0
       0          0          0
       0          0          0


ENDE STOHP  0.27
=STARTE,DUMP=A-REST,DATEN=FREMDSTRING
```

2. III(4) :

```
1744*                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=04  /P=06 /K=02 / C(3)   /   D(3)  UND

   0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000
   0.0833333  -0.0000000  -0.0166667  -0.0208333
   0.0833333   0.0166667  -0.0000000  -0.0061111
   0.0750000   0.0208333   0.0061111  -0.0001389

          *           *           *           *
          *           *           *           *
          *           *           *           *
          *           *           *           *

C(K) IST ERMUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

          0           0           0           0
          0           0           0           0
          0           0           0           0
          0           0           0  -0.0002778

ENDE STOHP  0.47
□STARTE,DUMP=A-NEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

3. $III_C(4)$:

```
1744=                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=04  /P=06 /K=02 / C(3)   /   D(3)  UND

  -0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000
   0.0833333   0.0000000  -0.0166667  -0.0208333
   0.0833333   0.0166667   0.0000000  -0.0061111
   0.0750000   0.0208333   0.0061111   0.0001389

          *           *           *           *
          *           *           *           *
          *           *           *           *
          *           *           *           *

C(K) IST ERMUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

          0           0           0           0
          0           0           0           0
          0           0           0           0
          0           0           0  -0.0002778

ENDE STOHP  0.48
□STARTE,DUMP=A-NEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

4. $\underline{III_A(4)}$:

```
1744=                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=04  ,P=06 ,K=02 , C(4)   ,   D(2)  UND

   0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000
   0.0833333   0.0000000  -0.0166667  -0.0208333
   0.0833333   0.0166667   0.0000000  -0.0055333
   0.0750000   0.0208333   0.0061111   0.0004167

        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *

C(K) IST ERMITTELT.

DIE MATRIX S=S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0           0
        0           0           0   0.0002778
        0           0   0.0002778   0.0008333

ENDE STOPP  0.50
=STARTE,DUMP=A=TEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

5. $\underline{III_B(4)}$:

```
1744=                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=04  ,P=06 ,K=02 , C(2)   ,   D(4)  UND

  -0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000
   0.0833333  -0.0000000  -0.0166667  -0.0208333
   0.0833333   0.0166667  -0.0000000  -0.0061111
   0.0750000   0.0208333   0.0058333  -0.0004167

        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *

C(K) IST ERMITTELT.

DIE MATRIX S=S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0           0
        0           0           0  -0.0002778
        0           0  -0.0002778  -0.0008333

ENDE STOPP  0.48
=STARTE,DUMP=A=TEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

6. Klass. RK(4)

oder

Gill(4) :

```
1744*                          -   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=04  ,P=04 ,K=01 , C(I)   ,   D(I)  UND

  -0.0000000  -0.0833333  -0.0333333  -0.0833333
   0.0833333  -0.0000000  -0.0208333  -0.0312500
   0.0833333   0.0208333  -0.0034722  -0.0156250
   0.0833333   0.0312500   0.0052083  -0.0076125

        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *

C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)*V(T)*V ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0           0
        0           0  -0.0069444  -0.0104167
        0           0  -0.0104167  -0.0156250

ENDE STOMP  0.43
*STARTE,LOMP=A-TEST,DATEN=/EREMDSTRING
```

7. Optimale Formel von Kuntzmann(4) :

```
1744*                          ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=04  ,P=04 ,K=01 , C(I)   ,   D(I)  UND

   0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0816667
   0.0833333   0.0000000  -0.0166667  -0.0258333
   0.0833333   0.0166667   0.0111111  -0.0090000
   0.0816667   0.0225000   0.0090000  -0.0009833

        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *
        *           *           *           *

C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)*V(T)*V ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0  -0.0033333
        0           0   0.0022222           0
        0  -0.0033333           0  -0.0015667

ENDE STOMP  0.44
*STARTE,LOMP=A-TEST,DATEN=/EREMDSTRING
```

8. 3/8-Regel(4) :

```
1744*                                  ZDV TUEBINGEN

ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=04  ,P=04 ,K=01 , C(1)    ,    D(1)  UND

   0.0000000  -0,0833333  -0,0833333  -0,0787037
   0.0833333  -0.0000000  -0,0138889  -0,0208333
   0.0833333   0,0138889   0,0046296  -0,0031864
   0.0787037   0,0162037   0,0123457   0,0051726


        *           *           *           %
        *           *           %           *
        *           %           %           %
        %           *           %           %


C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)*V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0          -0,0046296
        0           0           0,0092593   0,0092593
        0          -0,0046296   0,0092593   0,0101453

ENDE STDHP  0,43
aSTARTE,DUMP=A-NEST,DATEN= FREMDSTRING
```

9. DIRK(4) :

```
1744*                                  ZDV TUEBINGEN

ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=04  ,P=04 ,K=01 , C(1)    ,    D(1)  UND

   0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0,0806004
   0.0833333  -0.0000000   0.0039883   0,0073489
   0.0833333  -0,0039883   0.0164895   0,0287984
   0.0806004  -0.0073489   0,0226700   0,0371516


        *           *           *           %
        *           *           %           %
        *           %           %           %
        %           %           %           %


C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S-S(T)*V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

        0           0           0           0
        0           0           0           0
        0           0           0,0329789   0,0494054
        0           0           0,0494654   0,0740032

ENDE STDHP  0,46
aSTARTE,DUMP=A-NEST,DATEN=,FREMDSTRING
```

10. SINGLY(5) :

$\lambda = 0.5$

$p_{QF} = 6$

```
1744*                                         ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=05  ,P=05 ,K=02 , C(4)    ,    D(0)  UND

     0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000  -0.1000000
     0.0833333   0.0000000  -0.0166667  -0.0208333  -0.0083333
     0.0833333   0.0166667  -0.0000000  -0.0058594   0.0330729
     0.0750000   0.0208333   0.0060764   0.0003255   0.0459635
     0.0666667   0.0216146   0.0087674   0.0034749   0.0501660

         *           *           *           *           %
         *           *           *           *           %
         *           *           *           %           %
         *           *           %           %           %
         *           %           %           %           %

C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

         0           0           0           0        -0.0333333
         0           0           0           0         0.0132813
         0           0           0         0.0002170   0.0418403
         0           0         0.0002170   0.0006510   0.0494385
    -0.0333333   0.0132813   0.0418403   0.0494385   0.1003320

ENDE STDHP  0.97
=DSTARTE,DUMP=A-TEST,DATEN=/FREDSTRING
```

11. SINGLY(5) :

$\lambda = .2168805435$

$p_{QF} = 6$

```
1744*                                         ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
-----------------------------------

S=05  ,P=06 ,K=02 , C(4)    ,    D(1)  UND

    -0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000  -0.0666667
     0.0833333  -0.0000000  -0.0166667  -0.0208333  -0.0222618
     0.0833333   0.0166667  -0.0000000  -0.0058594  -0.0092977
     0.0750000   0.0208333   0.0060764   0.0003255  -0.0037133
     0.0666667   0.0216146   0.0087674   0.0034749  -0.0007318

         *           *           *           *           *
         *           *           *           *           %
         *           *           *           %           %
         *           *           %           %           %
         *           %           %           %           %

C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

         0           0           0           0           0
         0           0           0           0        -0.0006472
         0           0           0         0.0002170  -0.0005304
         0           0         0.0002170   0.0006510  -0.0002384
         0      -0.0006472  -0.0005304  -0.0002384  -0.0014636

ENDE STDHP  0.87
=DSTARTE,DUMP=A-TEST,DATEN=/FREDSTRING
```

12. SINGLY(5) :

$\lambda = 0.5$

$p_{QF} = 8$

```
1744*                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=05  /P=05 /K=02 / C(4)   /   D(0)  UND

 -0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000  -0.1000000
  0.0833333  -0.0000000  -0.0166667  -0.0208333  -0.0083333
  0.0833333   0.0166667   0.0000000  -0.0059524   0.0321429
  0.0750000   0.0208333   0.0059524   0.0000000   0.0464286
  0.0666667   0.0214286   0.0083333   0.0027849   0.0507058

      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *

C(K) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

          0           0           0           0  -0.0333333
          0           0           0           0   0.0130952
          0           0           0           0   0.0404762
          0           0           0           0   0.0492134
 -0.0333333   0.0130952   0.0404762   0.0492134   0.1014116

ENDE STOHP  0.89
*STARTE,DUMP=A-NEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

13. SINGLY(5) :

$\lambda = .2168805435$

$p_{QF} = 8$

```
1744*                                   ZDV TUEBINGEN
ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:
----------------------------------

S=05  /P=06 /K=02 / C(4)   /   D(1)  UND

  0.0000000  -0.0833333  -0.0833333  -0.0750000  -0.0666667
  0.0833333   0.0000000  -0.0166667  -0.0208333  -0.0222618
  0.0833333   0.0166667   0.0000000  -0.0059524  -0.0097011
  0.0750000   0.0208333   0.0059524   0.0000000  -0.0044254
  0.0666667   0.0214286   0.0083333   0.0027849  -0.0017906

      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *
      *           *           *           *           *

C(4) IST ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)HV ERGIBT SICH ZU:

          0           0           0           0           0
          0           0           0           0  -0.0008332
          0           0           0           0  -0.0013678
          0           0           0           0  -0.0016405
          0  -0.0008332  -0.0013678  -0.0016405  -0.0034612

ENDE STOHP  0.88
*STARTE,DUMP=A-NEST,DATEN=/FREMDSTRING
```

14. Nyström (6):

ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:

S=06 ,P=05 ,K=02 , C(1) , D(0) UND

0.0000000	-0.0833333	-0.0333333	-0.0750000	-0.0633333	-0.0508889
0.0833333	0.0000000	-0.0166667	-0.0191667	-0.0160000	-0.0108444
0.0833333	0.0166667	-0.0003704	-0.0041605	-0.0028165	0.0003412
0.0750000	0.0197222	0.0044568	0.0008949	0.0017071	0.0040276
0.0644444	0.0181481	0.0051786	0.0022413	0.0029276	0.0048226
0.0540741	0.0153432	0.0045961	0.0022939	0.0029521	0.0045640

* * * * * * *
* * * * % % %
* * % % % % %
* * % % % % %
* % % % % % %
* % % % % % %

(Columns read top to bottom: col. 1: * * * * % %; col. 2: * * * % % %; col. 3: * * % % % %; col. 4: * % % % % %; col. 5: % % % % % %; col. 6: % % % % % %)

C(K) IST NICHT ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

0	0	0	0	0.0011111	0.0031852
0	0	0	0.0005556	0.0021481	0.0044988
0	0	-0.0007407	0.0002963	0.0023621	0.0049373
0	0.0005556	0.0002963	0.0017897	0.0039483	0.0063215
0.0011111	0.0021481	0.0023621	0.0039483	0.0058552	0.0077747
0.0031852	0.0044988	0.0049373	0.0063215	0.0077747	0.0091280

ENDE STDHP 1.62

15. Lawson (6):

1744* ZDV TUEBINGEN

ES ERGIBT SICH FOLGENDE NORMALFORM:

S=06 ,P=05 ,K=02 , C(1) , D(1) UND

0.0000000	-0.0833333	-0.0833333	-0.0750000	-0.0666667	-0.0598958
0.0833333	0.0000000	-0.0166667	-0.0197917	-0.0200521	-0.0198568
0.0833333	0.0166667	0.0012153	-0.0032552	-0.0053711	-0.0069200
0.0750000	0.0208333	0.0084635	0.0042643	0.0016195	-0.0006205
0.0666667	0.0216146	0.0120768	0.0084391	0.0056531	0.0030807
0.0598958	0.0214844	0.0141900	0.0110819	0.0082738	0.0055146

(Columns read top to bottom: col. 1: * * * * * %; col. 2: * * * * % %; col. 3: * * % % % %; col. 4: * % % % % %; col. 5: * % % % % %; col. 6: % % % % % %)

C(K) IST NICHT ERFUELLT.

DIE MATRIX S+S(T)=V(T)MV ERGIBT SICH ZU:

0	0	0	0	0	0
0	0	0	0.0010417	0.0015625	0.0016276
0	0	0.0024306	0.0052083	0.0067057	0.0072700
0	0.0010417	0.0052083	0.0085286	0.0100586	0.0104614
0	0.0015625	0.0067057	0.0100586	0.0113062	0.0113546
0	0.0016276	0.0072700	0.0104614	0.0113546	0.0110291

ENDE STDHP 1.55

Literatur

1. A. Albert : Conditions for positive and nonnegative definitness in terms of pseudoinverses. SIAM J.Appl.Math. 17, 1969,434-440.

2. B.D.O. Anderson : A system theory criterion for positive real matrices. SIAM J.Control 5, 1967,171-182.

3. B.D.O. Anderson and J.B. Moore : Algebraic structure of generalized positive real matrices. SIAM J. Control 6,1968,615-624.

4. S. Barnett : Matrices in Control Theory. Van Nostrand, 1971.

5. S. Barnett : Introduction to Mathematical Control Theory. Clarendon Press, 1975.

6. V. Belevitch : The Gauß hypergeometric ratio as a positive real function. SIAM J.Math.Anal. 13,1982,1024-1040.

7. C. Brezinski : Padé-Type Approximations and General orthogonal Polynomials. Birkhäuser,1980.

8. A.Ya. Bulgakov : An effectively calculable parameter for the stability property of a system of linear differential equations with constant coefficients. Sibirian J. of Mathcs. 1980,339-347.

9. K. Burrage : A special family of Runge-Kutta methods for solving stiff differential equations. BIT 18,1978a, 22-41.

10. K. Burrage : High order algebraically stable Runge-Kutta methods. BIT 18,1978b, 373-383.

11. K. Burrage : Efficiently implementable algebraically stable Runge-Kutta methods. SIAM J.N.A. 19,1982, 245-258.

12. K. Burrage and J.C. Butcher : Stability criteria for implicit Runge-Kutta methods. SIAM J.N.A. 16,1979, 46-57.

13. K. Burrage and J.C. Butcher : Nonlinear stability of a general class of differential equation methods. BIT 20,1980, 185-203.

14. K. Burrage and J.C. Butcher and F.H. Chipman : STRIDE. Stable Runge-Kutta integrator for differential equations. Comp. Math. Report Nr. 20, Univ. of Auckland, 1979.

15. K. Burrage and J.C. Butcher and F.H. Chipman : An implementation of SINGLY implicit Runge-Kutta methods. BIT 20,1980, 326-340.

16. J.C. Butcher : Implicit Runge-Kutta processes. Math. Comp. 18, 1964a,50-64.

17. J.C. Butcher : Integration processes based on Radau Quadrature formulas. Math. Comp. 18,1964b, 233-244.

18. J.C. Butcher : A stability property of implicit Runge-Kutta methods. BIT 15,1975, 358-361.

19. J.C. Butcher : On the implementation of implicit Runge-Kutta methods. BIT 16,1976, 237-240.

20. J.C. Butcher : On A-stable implicit Runge-Kutta methods. BIT 17,1977, 375-378.

21. J.C. Butcher : AN-stability is not equivalent to algebraic stability. Comp. Math. Report Nr. 26, Univ. of Auckland,1981.

22. D. Carlson : Rank and inertia bounds for matrices under $R(AH) \geq 0$. J.Math.Anal.Applcs. 10,1965, 100-111.

23. D. Carlson and H. Schneider : Inertia theorems for matrices: The semidefinit case. J.Math.anal.Applcs.6,1963, 430-446.

24. F.H. Chipman : A-stable Runge-Kutta processes. BIT 11,1971, 384-388.

25. M. Crouzeix : Sur la B-stabilité des méthodes de Runge-Kutta. Num. Math. 32,1979, 75-82.

26. G. Dahlquist : A special stability problem for linear multistep methods. BIT 3,1963, 27-43.

27. G. Dahlquist : On stability and error analysis for stiff nonlinear problems I. Report TRITA-NA 7508, Roy. Inst. Techn., Stockholm,1975.

28. G. Dahlquist : Positve functions and some applications to stability questions for numerical methods. In 'Recent Advances in Numerical Analysis III',Ed. C. deBoor and G. Golub,1978a, 1-29.

29. G. Dahlquist : G-stability is equivalent to A-stability. BIT 18,1978b, 384-401.

30. G. Dahlquist and R. Jeltsch : Generalized disks of contractivity for explicit and implicit Runge-Kutta methods. Report TRITA-NA 7906,Roy. Inst. Techn., Stockholm,1979.

31. B.L. Ehle: On Padé-Approximations to the exponential function and A-stable methods for the numerical solution of initial value problems. Thesis, Univ. of Waterloo, 1969.

32. R.A. Frazer and W.J. Duncan and A.R. Collar : Elementary Matrices. Cambridge 1965.

33. I. Gladwell and D.K. Sayers : Computational Techniques for Ordinary Differential Equations. Academic Press 1980.

34. R.D. Grigorieff : Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen. BandI. B.G. Teubner, 1972.

35. W. Gröbner : Matrizen. Bibl. Institut, Heidelberg 1966.

36. E. Hairer : Highest possible order of algebraically stable diagonally implicit Runge-Kutta methods. BIT 20,1980, 254-256.

37. E. Hairer : Constructive characterization of A-stable approximations to exp(z). Num. Math. 39,1982, 247-258.

38. E. Hairer and G. Wanner : Characterization of nonlinearly stable implicit Runge-Kutta methods. Skript, 1980.

39. E. Hairer and G. Wanner : Algebraically stable and implementable Runge-Kutta methods of high order. SIAM J.N.A. 18, 1981, 1098-1108.

40. G. Hall and J.N. Watt : Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Clarendon Press, 1976.

41. P. Henrici : Applied and Computational Complex Analysis..Vol. 2. John-Wiley 1977.

42. Huang Mingyou : On the contractivity regions of Runge-Kutta methods. Report TRITA-NA 8106, Roy. Inst. Techn., Stockholm, 1981.

43. W.H. Hundsdorfer and M.N. Spijker : A note on B-stability of Runge-Kutta methods. Num. Math. 36,1981, 319-331.

44. W.B. Jones and W.J. Thorn : Continued Fractions. Addison-Wesley 1980.

45. R.E. Kalman : Mathematical description of linear dynamical dynamical systems. SIAM J.Control 1,1963,152-192.

46. R.H. Martin : Remarks on ordinary differential equations involving dissipative and compact operators. J. London Math. Soc. 10(2),1975, 61-65.

47. P.C. Müller : Stabilität und Matrizen. Springer Verlag 1977.

48. S.P. Nørsett : C-Polynomials for rational approximations to the exponential function. Num. Math 25, 1975, 39-56.

49. S.P. Nørsett and G. Wanner : Perturbed collocation and Runge-Kutta methods. Num. Math. 38,1981, 193-208.

50. S.P. Nørsett and A. Wolfbrand : Attainable order of rational approximations to the exponential functin with only real poles. BIT 17,1977, 200-208.

51. O. Perron : Die Lehre von den Kettenbrüchen II. B.G. Teubner, 3. Aufl., 1957.

52. R. Scherer : Über die Stabilität gespiegelter und halbexpliziter Runge-Kutta-Verfahren. Habil.-Schrift der Univ. Tübingen, 1976.

53. R. Scherer : A necessary condition for B-stability. BIT 19,1979, 111-115.

54. R. Scherer :Zusammenhänge zwischen verschiedenen Klassen impliziter Runge-Kutta-Verfahren. In: Proceedings of a Symp. in Oberwolfach on 'Numerical Methods for Solving Stiff Initial Value Problems',1981, ed. by G. Dahlquist and R. Jeltsch.

55. R. Scherer and H. Türke :Reflected and transposed Runge-Kutta methods. BIT 23, 1983, 262-266.

56. J. Snyders and M. Zakai : On nonnegative solutions of the equation AD + DA' = -C. SIAM J.Appl.Math. 18, 1970, 704-715.

57. G. Sottas and G. Wanner : The number of positive weights of a quadrature formula. BIT 22,1982, 339-352.

58. M.N. Spijker : Contractivity in the numerical solution of initial value problems. Report Nr. 82-10, Inst. of Appl. Math. and Comp. Science, Leiden, 1982.

59. H.J. Stetter : Analysis of Discretization Methods for Ordinary Differential Equations. Springer Verlag, 1973.

60. J.G. Verwer : On the practical value of the notion of BN-stability. BIT 21,1981, 355-361.

61. H.S. Wall : Analytic Theory of Cotinued Fractions. Chelsea Publ. 1948.

62. G. Wanner : A short proof of nonlinear A-stability. BIT 17,1977, 226-227.

63. G. Wanner : On the choice of γ for SINGLY-implicit RK or Rosenbrock methods. BIT 20,1980a, 102-106.

64. G. Wanner : Charactrization of all A-stable methods of order 2m-4. BIT 20,1980b, 367-374.

65. G. Wanner and E. Hairer and S.P. Nørsett : Order stars and stability theorems. BIT 18,1978, 475-489.

66. H.K. Wimmer : Über Matrizen mit semidefinitem Realteil. Monatshefte für Math. 76,1972, 276-281.

67. H.K. Wimmer : Inertia theorems for matrices, controllability and linear vibrations. Lin.Alg. and its Applcs. 8, 1974, 337-343.

68. L. Euler : Institutiones calculi integralis. Petersburg, 1768-1770.

69. W. Kutta : Beiträge zur näherungsweisen Integration totaler Differentialgleichungen. Z.Math. Phys. 46, 1901, 435-453.

70. C. Runge : Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen. Math. Annalen 46, 1895, 167-178.

Lebenslauf

Geboren am 17. August 1952 in Eggenfelden/Niederbayern als Sohn des kaufmännischen Angestellten Josef Türke und seiner Ehefrau Therese, geb. Auer.

1959 - 1963	Grundschule in Stuttgart-Rohr
1963 - 1972	Hegel-Gymnasium in Stuttgart-Vaihingen
Juni 1972	Abitur
1972 - 1973	Wehrdienst
Okt.1973 - Feb.1974	Maschinenbau-Studium in Stuttgart
Apr.1974 - 1979	Studium der Mathematik mit Nebenfach Physik in Tübingen
Oktober 1979	Diplomprüfung in Mathematik

Seit 1. Dezember 1979 Tätigkeit als Wissenschaftlicher Angestellter im Mathematischen Institut der Universität Tübingen.

Meine akademische Ausbildung verdanke ich den Herren Professoren und Akademischen Räten S. Breitsprecher, M. Dal Cin, H. Eikemeier, H. Fischer, W. Forst, F. Gönnenwein, W. Grölz, W. Güttinger, K. Kirchgässner, F. Lenz, H. H. Schaefer, R. Scherer, U. Schlotterbeck, A. Schönhage, G. Schubring, O. Tamaschke, H. Wittern, A. Wolf, M. Wolff und K. Zeller.

Druck und Verarbeitung: copy shop, darmstadt, tel. 21353